МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

На правах рукописи

Филинов Алексей Владимирович

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Специальность 01.04.02. - “Теоретическая физика”

диссертация на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

кандидат физ.-мат. наук, профессор

Ю. Е. Лозовик

Москва, 2001

Оглавление

Список таблиц

Список иллюстраций

Введение

Теоретическое изучение равновесных и динамических свойств сильно взаимодействующих электронных систем представляет большой интерес для понимания фундаментальных вопросов современной физики твердого тела. Построение теорий с хорошим количественным описанием подобных систем представляет трудоемкую задачу в силу необходимости одновременного учета многочисленных факторов, например, квантовой статистики и эффектов межчастичных корреляций. Однако за последнее время здесь наблюдается значительное продвижение и строгие аналитические решения получены не только для модельных систем, а также для некоторых важных предельных случаев теории многих тел. Стремление изучать более широкий класс реалистичных систем со сложными гамильтонианами в широком диапазоне управляющих физических параметров, т.е. плотности, температур, параметра неидеальности и т.д., привело также к тому, что одним из инструментов теоретических исследований становятся методы численного моделирования. В этой связи широкое распространение получили методы Монте-Карло, молекулярной динамики и их модификации [1]-[4]. Важные преимущества методов численного эксперимента заключаются в том, что их применение не ограничивается малостью тех или иных параметров и погрешность вычислений контролируется в рамках самого метода. Более того, результаты исследований, полученные с помощью численных расчетов, могут служить основой для построения новых и улучшения существующих аналитических моделей, а также для предсказания новых эффектов, которые возможно обнаружить в ходе проведения физического эксперимента.

Настоящая диссертация состоит из трех глав.

Первая глава посвящена описанию численных методов, использовавшихся в диссертации.

В первой части описывается новый численный подход для вычисления динамических характеристик квантовых систем сильно взаимодействующих частиц. Рассматриваемый метод обобщает метод классической молекулярной динамики в рамках вигнеровского формализма квантовой механики. Для решения уравнения Вигнера-Лиувилля, описывающего эволюцию квантовой системы во времени, разрабатывается специальный подход, основанный на общей теории методов Монте-Карло для решения интегральных уравнений.

Во второй части, для системы неразличимых частиц подчиняющихся статистике Ферми выводится аналитическое выражение многочастичной матрицы плотности для вычислений методом Монте-Карло. Для этого используется групповое свойство оператора плотности, высокотемпературное приближение для матричных элементов и возможность представления суммы $N!$ членов антисимметризованной матрицы плотности в виде соответствующего детерминанта, учитывающего перестановки. Окончательному выражению дается интерпретация классического конфигурационного интеграла по всем возможным траекториям во мнимом времени. Описывается способ вычисления интегралов по траекториям с помощью алгоритма Метрополиса и его модификаций.

Во второй главе обсуждаются основные результаты моделирования свойств электронных систем, полученные методом квантовой молекулярной динамики. Исследуются особенности нестационарных задач туннелирования, возникающих при прохождении волновых пакетов через потенциальные барьеры, а также решается задача о локализации электронов в неупорядоченных системах рассеивателей.

Третья глава посвящена результатам моделирования термодинамических свойств и фазовых переходов систем электронов в квантовых точках. Для этого используется метод квантового Монте-Карло интегрирования по траекториям. Во введении обоснована актуальность проблемы, описываются возможные физические реализации систем отталкивающихся частиц во внешних потенциалах. Обсуждаются результаты моделирования двумерных классических кулоновских кластеров, электронных кластеров в системе вертикально связанных точек, а также кулоновских кластеров в квантовом режиме. Построены фазовые диаграммы для двухстадийного плавления, протекающего через ориентационное и радиальное разупорядочение оболочек. Обсуждается роль квантовых флуктуаций в процессах плавления.

В заключении представлены основные результаты диссертации.

Глава 1

Методы численного моделирования использовавшиеся в диссертации

1.1 Метод квантовой молекулярной динамики

В последние два десятилетия наблюдается бурный рост числа работ, посвященных численному решению задач квантовой механики и квантовой статистической физики. Большую часть этих работ можно отнести к одному из трех основных направлений или численных подходов, которые в настоящее время получили широкое практическое применение.

Первое направление связано с решением дифференциальных уравнений в частных производных на конечно разностной сетке, например, уравнения Шредингера для волновой функции. Успехи достигнутые в решении уравнения Шредингера при применении конечно разностных методов [5]-[7] (иногда в сочетании с быстрым фурье-преобразованием), связаны, как правило, с рассмотрением одной или двух квантовых частиц. Возможности современных компьютеров не позволяют пока применять этот подход к *ансамблю* квантовых частиц в трехмерном пространстве.

Второе направление связано с исследованием термодинамических свойств ансамбля квантовых частиц в трехмерном пространстве. В решении этого класса задач широкое применение получило представление физических величин и моментов функций Грина с помощью винеровских интегралов по траекториям, для расчета которых успешно используется метод Монте-Карло [8]-[11]. Однако данный подход не применим к точному решению динамических квантовомеханических задач, так как динамические величины, строго говоря, могут быть представлены только в виде комплекснозначных фейнмановских интегралов по траекториям. Расчет интегралов Фейнмана потребовал обобщение метода Монте-Карло для работы с комплексными функциями [12]-[15].

В настоящее время достигнутые здесь успехи ограничиваются рассмотрением одной квантовой частицы и ансамбля классических рассеивателей. Переход к большему количеству квантовых частиц возможен, но весьма сложен в алгоритмической реализации и требует мощных быстродействующих компьютеров, использующих параллельные процессоры.

В третьем направлении используется подход, предложенный в работах R. Car и M. Parrinello [16]. Метод Car-Parrinello [16]-[21] является расширением молекулярно-динамической схемы, в котором используется метод функционала плотности и электронные степени свободы учитываются явно. Он позволяет вычислять динамические свойства плотности валентных электронов, строго говоря, лишь при нулевой температуре. Непосредственно можно наблюдать адиабатическое движение плотности основного состояния. Если известна плотность основного состояния электронов, то приближенно могут быть вычислены возбужденные электронные состояния и переносные свойства.

В данной диссертации рассматривается четвертый подход к численному решению задач квантовой статистической физики. Его главная идея заключается в исследовании динамических свойств квантовых систем с помощью совместного распределения квазивероятностей для координаты и импульса - вигнеровская формулировка квантовой статистической механики.

В 1932 году Вигнер предложил представление квантовой механики при помощи совместных распределений квазивероятностей для координаты и импульса и получил квантовомеханический аналог классического уравнения Лиувилля для функции распределения [22]. Функция совместных распределений квазивероятностей полностью описывает эволюцию системы в фазовом пространстве и является Фурье преобразованием произведения матричных элементов динамического оператора эволюции. Значения наблюдаемых величин выражаются через фазовые интегралы от функции распределения и символов Вейля операторов, соответствующих наблюдаемым величинам.

Эта статья дала толчок большой серии последующих работ, посвященных формальным аспектам квантовой теории в фазовом пространстве. Вигнеровское представление содержит лишь такие понятия, которые являются общими как для квантовой, так и для классической механики, поэтому оно особенно удобно, когда одна из взаимодействующих друг с другом систем описывается квантовой, а другая - классической теорией. Далее были работы, в которых рассматривался целый класс представлений квантовой механики в фазовом пространстве, включающие вигнеровское представление как частный случай.

Также были получены обобщения, учитывающие статистику, спин и электромагнитное поле [18, 19], [23]-[25].

В данной диссертации для решения эволюционного уравнения Вигнера предлагается новый численный подход [26, 27], который использует комбинацию методов молекулярной динамики и метода Монте-Карло. Будут рассмотрены два подхода применительно к каноническому и микроканоническому ансамблю, и разработаны численные методы решения интегральных уравнений Вигнера-Лиувилля, соответствующих каждому ансамблю.

С помощью предлагаемого метода были получены серии результатов для одномерной локализации электронов в неупорядоченной системе рассеивателей [28], вычислены средние квантово-механических операторов, включая дисперсии импульсов и координат, функция распределения по энергиям, а также частотные зависимости для электропроводности и диэлектрической проницаемости по квантовым формулам Кубо. Также было исследовано туннельное прохождение волновых пакетов через потенциальные барьеры [29, 30], проведены расчеты квантовых временных корреляционных функций. Результаты моделирования обсуждаются в главе 2.

Основные результаты настоящей главы опубликованы в работах [26, 27].

1.1.1 Функция Вигнера в микроканоническом ансамбле

Вигнеровское представление квантовой механики

Рассмотрим систему N взаимодействующих частиц с гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \hat{p}_i^2/2m + \sum_{i=1}^{N} \tilde{V}(q_i) + \sum_{i<j} V(q_i, q_j) \tag{1.1}$$

Пусть N-частичная волновая функция ψ удовлетворяет уравнению Шредингера с обычными начальными условиями

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi; \quad \psi\left(t_0\right) = \psi^0\left(q\right) \tag{1.2}$$

Функция Вигнера-Лиувилля является фурье-образом недиагонального элемента матрицы плотности и определяется соотношением

$$W\left(q,p,t\right) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{dN}} \int \rho(q - \frac{\xi}{2}, q + \frac{\xi}{2}; t) \exp\left(ip\xi/\hbar\right) d\xi, \tag{1.3}$$

где

$$\rho(q-\frac{\xi}{2},q+\frac{\xi}{2};t)=\psi(q-\frac{\xi}{2},t)\psi^{*}(q+\frac{\xi}{2},t)$$

- квантовомеханическая матрица плотности; q,ξ - вектора размерности $\{d\cdot N\}$; d - размерность пространства.

Дифференцируя по времени функцию распределения, подставляя ее в правую часть уравнения Шредингера вместо производной по времени от функции ψ и интегрируя по частям, можно получить интегро-дифференциальное уравнение Вигнера-Лиувилля [25]

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\left(\frac{p}{m}|\frac{\partial W}{\partial q}\right)+\left(F\left(q\right)|\frac{\partial W}{\partial p}\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}ds\,W\left(p-s,q,t\right)\,\omega\left(s,q,t\right), \qquad (1.4)$$

где функция

$$\omega\left(s,q,t\right)=\frac{2}{(\pi\hbar^{2})^{dN}}\int dq'V\left(q-q',t\right)\sin\left(\frac{2sq'}{\hbar}\right)+\left(F\left(q\right)|\frac{d\delta\left(s\right)}{ds}\right) \qquad (1.5)$$

учитывает нелокальный вклад потенциала, $F\left(q\right)=-\partial V\left(q\right)/\partial q$ - классическая сила, скобки $(\ldots|\ldots)$ - скалярное произведение двух векторов размерности $\{d\cdot N\}$; операторы частной производной являются векторами с компонентами

$$\{\partial/\partial q_{1}^{1},\ldots,\partial/\partial q_{1}^{d},\ldots,\partial/\partial q_{N}^{1},\ldots,\partial/\partial q_{N}^{d}\}=\{\frac{\partial}{\partial q}\} \qquad (1.6)$$

В классическом пределе ($\hbar\to 0$) уравнение (1.4) переходит в уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}=-F\left(q\right)\frac{\partial W}{\partial p} \qquad (1.7)$$

В вигнеровском представлении квантовомеханическое среднее оператора $\hat{A}$ в нестационарном состоянии $|\psi(t)\rangle$ выражается как интеграл по фазовому пространству

$$A\left(t\right)=\left\langle\psi(t)\left|\hat{A}\right|\psi(t)\right\rangle=\iint dqdp\,A\left(q,p\right)W\left(q,p,t\right), \qquad (1.8)$$

где по определению вводится символ Вейля $A\left(q,p\right)$ оператора $\hat{A}$

$$A\left(q,p\right)=\int d\xi\exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right)\langle q+\frac{\xi}{2}\left|\hat{A}\right|q-\frac{\xi}{2}\rangle \qquad (1.9)$$

Решение уравнения Вигнера-Лиувилля

Рассмотрим функцию Грина G классического уравнения Лиувилля (1.7)

$$G(p,q,t;p_0,q_0,t_0) = \delta(p - \overline{p}(t;t_0,p_0,q_0))\delta(q - \overline{q}(t;t_0,p_0,q_0)),$$

где $\overline{p}$ и $\overline{q}$ - решения уравнений Гамильтона ($t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} d\bar{q}/d\tau &= \bar{p}(\tau)/m; \quad \bar{q}(0) = q_0 \\ d\bar{p}/d\tau &= F(\bar{q}(\tau)); \quad \bar{p}(0) = p_0 \end{aligned} \tag{1.10}$$

Запишем решение уравнения (1.4) с помощью функций Грина

$$W(p,q,t) = \int dp_0 dq_0\, G(p,q,t;p_0,q_0,0)\, W(p_0,q_0,0) +$$
$$\int_0^t dt_1 \int dp_1 dq_1\, G(p,q,t;p_1,q_1,t_1) \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,q_1,t_1)\, W(p_1 - s_1,q_1,t_1) \tag{1.11}$$

Используем аналогичное выражение для функции $W(p_1 - s_1, q_1, t_1)$ и подставим его в правую часть (1.11), тогда решение запишется в виде

$$\begin{aligned} &W(p,q,t) = \\ &= \int dp_0 dq_0\, G(p,q,t;p_0,q_0,0)\, W(p_0,q_0,0) + \int_0^t dt_1 \int dp_1 dq_1\, G(p,q,t;p_1,q_1,t_1) \\ &\times \Big[\int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega_1(s_1,q_1,t_1) \int dp_0 dq_0\, G(p_1 - s_1,q_1,t_1;p_0,q_0,0)\, W(p_0,q_0,0) + \\ &+ \int_0^{t_1} dt_2 \int dp_2 dq_2\, G(p_1 - s_1,q_1,t_1;p_2,q_2,t_2) \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_2\, \omega(s_2,q_2,t_2)\, W(p_2 - s_2,q_2,t_2) \Big] \end{aligned} \tag{1.12}$$

Первый член $W^0(p,q,t) = \int dp_0 dq_0 G(p,q,t;p_0,q_0,0) W(p_0,q_0,0)$ в правой части (1.12) это вигнеровская функция начального состояния, которая распространяется вдоль классических характеристик - решений уравнений Гамильтона (1.10) в интервале $[0,t]$. Стоит отметить, что даже этот первый член описывает не только классические, но и квантовые эффекты, поскольку функция $W(p_0,q_0,0)$ содержит все степени постоянной Планка ($\hbar$) волновых функций начального состояния, которые стоят в определении (1.3). Второй и третий член в правой части (1.12) описывают остальные квантовые поправки в эволюции функции $W(p,q,t)$. Обозначим второй член через $W^1(p,q,t)$ и рассмотрим подробнее его структуру

$$W^1(p,q,t) = \int_0^t dt_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} dp_1 dq_1\, G(p,q,t;p_1,q_1,t_1) \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,q_1,t_1) \\ \times \int dp_0 dq_0\, G(p_1 - s_1, q_1, t_1; p_0, q_0, 0) W(p_0,q_0,0) \quad (1.13)$$

Многократный интеграл в правой части можно вычислить, используя статистический подход. Для этого необходимо рассмотреть статистический ансамбль модифицированных классических траекторий. Каждой траектории приписывается своя весовая функция, которая дает вклад в интегральное выражение (1.13). Рассмотрим траекторию с началом в точке фазового пространства $\{p_0, q_0, t = 0\}$ и со значением весовой функции $W(p_0,q_0,0)$. До некоторого момента t_1 ее эволюция описывается функцией Грина $G(p_1 - s_1, q_1, t_1; p_0, q_0, 0)$. В момент t_1, как следует из выражения (1.13), весовая функция траектории должна домножаться на фактор $\omega(s_1,q_1,t_1)$, а величина импульса траектории получает случайное возмущение на величину s_1: $(p_1 - s_1) \to p_1$. В результате, в фазовом пространстве траектория претерпевает разрыв. Теперь траектория состоит из двух частей - решений классической системы уравнений (1.10), разделенных в импульсном пространстве на расстояние s_1. Статистический ансамбль траекторий необходим по той причине, что момент времени t_1 должен выбираться случайно в интервале $[0,t]$, а величина возмущения импульса s_1 в интервале $(-\infty, +\infty)$. Рассмотрев бесконечное число траекторий, мы можем вычислить функцию $W^1(p,q,t)$ и учесть следующую квантовую поправку к эволюции функции $W^0(p,q,t)$.

Рассмотрим теперь третий член в правой части выражения (1.12). Подставим вместо функции $W(p_2 - s_2, q_2, t_2)$ ее интегральное представление из выражения (1.11). Теперь третий член может быть записан в виде

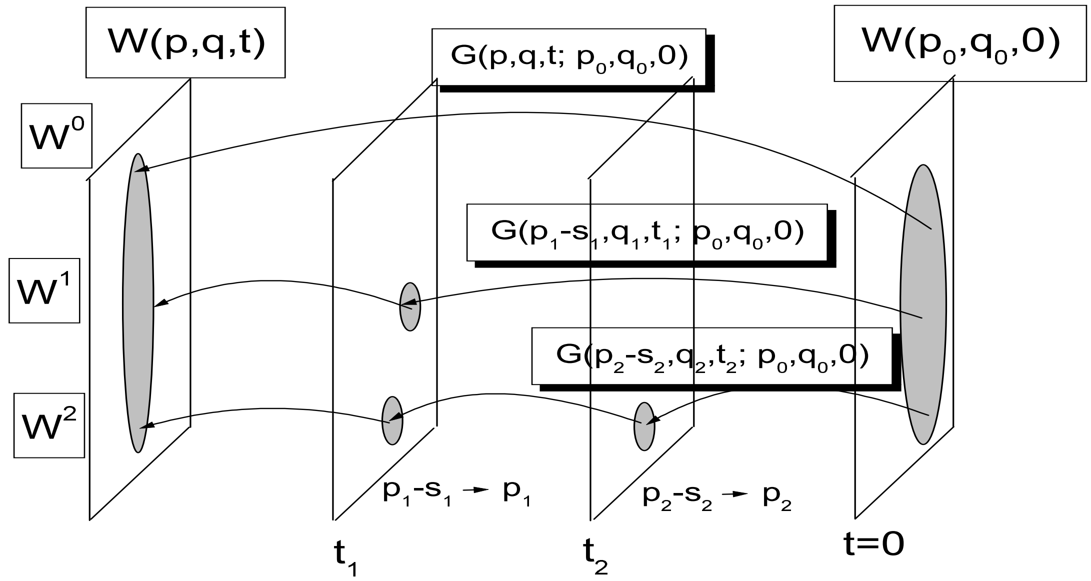
$$W^2\,(p,q,t) = \int_0^t dt_1 \int dp_1 dq_1 G(p,q,t;p_1,q_1,t_1) \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,q_1,t_1)$$

$$\times \int_0^{t_1} dt_2 \int dp_2 dq_2\, G(p_1-s_1,q_1,t_1;p_2,q_2,t_2) \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_2\, \omega(s_2,q_2,t_2)$$

$$\times \int dp_0 dq_0 G(p_2-s_2,q_2,t_2;p_0,q_0,0)\, W(p_0,q_0,0) \qquad (1.14)$$

Если применить статистический подход, который мы использовали в случае с $W^1\,(p,q,t)$, то этот член можно представить, как вклад ансамбля классических траекторий с двумя возмущениями импульса p, происходящих в два случайных момента времени t_1, t_2 и с весовой функцией, которая домножается в эти моменты времени на весовые факторы $\omega(s_1,q_1,t_1), \omega(s_2,q_2,t_2)$.

Используя этот прием несколько раз, можно получить члены квантовых поправок более высокого порядка. В конечном итоге фунция $W(p,q,t)$ будет выражена как бесконечная сумма членов итерационного ряда, причем каждый член ряда будет представлять вклад статистического ансамбля траекторий определенного топологического типа. Эти траектории состоят из отрезков классических траекторий разделенных возмущениями импульса. Число возмущений совпадает с номером члена итерационного ряда. На Рис. показаны траектории, соответствующие функциям W^0, W^1, W^2.



Конечно, в выражении для итерационного ряда невозможно учесть вклад всех траекторий, однако в этом и нет необходимости. Далее изложен алгоритм построенный на общей теории методов Монте-Карло, который обеспечивает существенную выборку траекторий, дающих главный вклад (имеются ввиду их весовые функции) в функцию Вигнера $W(q,p,t)$. Разработанный алгоритм также существенно уменьшает вычислительные затраты, необходимые на вычисление отдельных интегралов, входящих в каждый член итерационного ряда.

Перед описанием метода Монте-Карло для статистического отбора траекторий, введем формализ удобный для записи общей структры членов итерационного ряда.

Выражение для квантовых поправок произвольного порядка

Введем обобщенное фазовое пространство $\Omega = \{p,q,t\}$ и интегральное ядро, совпадающее с функцией Грина

$$K_0(P,P_0) \equiv \theta(t-t_0)G(p,q,t;p_0,q_0,t_0)\delta(t_0-0)$$

где $\{P=(p,q,t), P_0=(p_0,q_0,0)\}$ - точки в фазовом пространстве. Перепишем нулевую поправку функции Вигнера в виде

$$W^0\left(P\right) = \int dp_0 dq_0 G(p,q,t;p_0,q_0,0)W(p_0,q_0,0) = \int\limits_{\Omega} dP_0 K_0(P,P_0)W^0\left(P_0\right),$$

где $W^0\left(P_0\right)$ - функция, которая описывает начальное состояние системы. Введем также оператор возмущения импульса, действующий на переменную p, и обладающий следующими свойствами

$$\begin{aligned} \widehat{J}_s &\equiv e^{-s\nabla_p} \\ \widehat{J}_s F(p) &= e^{-s\nabla_p}F(p) = F(p-s) \end{aligned} \tag{1.15}$$

Теперь введем определение интегрального ядра

$$K(P,P_i) = \theta(t-t_i)\theta(t_i)G(p,q,t;p_i,q_i,t_i)\, e^{-s_i\nabla_{p_i}}, \tag{1.16}$$

где θ - тэта функция. Определим также для удобства подпространство $\widetilde{\Omega} = \{q,t\}$ пространства Ω, тогда $\omega\left(s,q,t\right) = \omega\left(s,\widetilde{P}\right), \widetilde{P} \in \widetilde{\Omega}$. В новых обозначениях первая квантовая поправка к классической эволюции функции Вигнера записывается в виде

$$W^1(P) = \int\limits_{\Omega} dP_1 \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,\, \widetilde{P}_1) K(P, P_1) W^0(P_1)$$

$$= \int\limits_{\Omega} dP_1 \int\limits_{\Omega} dP_0 \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,\, \widetilde{P}_1) K(P, P_1) K_0(P_1, P_0) W^0(P_0) \qquad (1.17)$$

Используя итерационную процедуру, которая изложена в предыдущем разделе, можно получить функцию описывающую поправки произвольного порядка i. В новых обозначениях эта функция примет вид

$$W^i(P) = \int\limits_{\Omega} dP_i \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_i\, \omega(s_i,\, \widetilde{P}_i)\, K(P, P_i)\, W^{i-1}(P_i) = \int\limits_{\Omega} \ldots \int\limits_{\Omega} dP_i dP_{i-1} \ldots dP_0$$

$$\times \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_i\, \omega(s_i,\, \widetilde{P}_i) \ldots \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1\, \omega(s_1,\, \widetilde{P}_1) K(P, P_i)\, K(P_i, P_{i-1}) \ldots K_0(P_1, P_0)\, W^0(P_0)$$

$$(1.18)$$

Вычисление линейных функционалов

Решение уравнения Вигнера-Лиувилля можно представить в виде итерационного ряда, который с учетом введенных обозначений (1.18) можно записать как

$$W(P) = W^0(P) + \sum_{i=1}^{\infty} W^i(P) \qquad (1.19)$$

В обобщенном фазовом пространстве $\Omega = \{p, q, t\}$ квантовомеханическое среднее оператора $\hat{A}$ определяется интегралом

$$\langle A(t')\rangle = \iint dq dp\, A(p, q)\, W\left(p, q, t'\right) = \int\limits_{\Omega} A'(P)\, W(P)\, dP, \qquad (1.20)$$

где мы ввели обобщенный символ Вейля оператора $\hat{A}$

$$A'(P) = \delta(t' - t)\, A(p, q) \qquad (1.21)$$

Определим в пространстве Ω скалярное произведение $(\ldots,\ldots)$ и перепишем выражение (1.20) окончательно в виде

$$\langle A(t^{'})\rangle = \Big(A^{'}(P), W^{0}\left(P\right)\Big) + \sum_{i=1}^{\infty}\Big(A^{'}(P), W^{i}\left(P\right)\Big) \tag{1.22}$$

В соответствии с общей теорией методов Монте-Карло можно одновременно вычислять все члены рядов (1.19) и (1.22). Для этого необходимо организовать схему Монте-Карло, которая обеспечивала бы существенную выборку членов ряда, дающих главный вклад. Выше уже обсуждалась статистическая интерпретация ряда (1.19) с помощью ансамбля динамических траекторий. Таким образом, задача сводится к разработке схемы Монте-Карло, которая бы из всего ансамбля траекторий отбирала только наиболее важные.

Кроме уравнений Гамильтона (1.10) положение траектории в фазовом пространстве Ω однозначно определяется начальными условиями $P_0 = (p_0, q_0, t = 0) \in \Omega$ и набором точек $\{P_m\}|_{m=1}^{i}$ в которые она переходит после возмущений импульса на величину $\{s_m\}|_{m=1}^{i}$.

Обозначим через $\{T_i = (P_0 \to P_1 \to \ldots \to P_i \to P)\}$ траекторию, которая дает вклад в член итерационного ряда W^i (вдоль траектории i раз происходит возмущение импульса). Пусть начало траектории выбирается с некоторой вероятностью $p(P)$ (наиболее оптимальный выбор соответствует случаю, когда $p(P) \sim |W(p,q,0)|$, $sign\{W(p,q,0)\}$ идет в весовую функцию траектории). Введем обозначение - $a(P_j),\ \ 1 \leq j \leq i$ для вероятности *принять возмущение импульса* траектории T_i, а через $p(P,P^{'})$ обозначим *вероятность перехода* между разными точками фазового пространства $P \to P^{'}$.

Рассмотрим теперь правила по которым будем производится построение траекторий (выбор конкретной функциональной зависимости введеных вероятностей для организации существенной выборки методом Монте-Карло обсуждается в следующем разделе).

Правила построения траекторий

1. С вероятностью $p(P_0)$ выбирается начальная точка траектории $P_0 = \{p_0, q_0, s_0 = 0, t = 0\}$. Весовой функции траектории приписывается значение $W(p_0, q_0, 0)/p(P_0)$.

2. С помощью вероятности переходов $p(P_j, P_{j+1})$ выбирается момент времени t_{j+1} и величина возмущения импульса s_{j+1}. С помощью уравнений

Гамильтона (1.10) из точки P_j строится классическая траектория до момента времени t_{j+1} включительно.

3. Для принятия решения о возмущении импульса траектории вероятность $a(P_{j+1})$ сравнивается со случайным числом $\xi \in [0,1]$

$$\begin{cases} a(P_{j+1}) > \xi, & \text{(a)}, \\ a(P_{j+1}) \leq \xi, & \text{(b)}. \end{cases}$$

   (a) происходит скачок импульса $p(t_{j+1}) \to p(t_{j+1}) + s_{j+1}$, весовая функция траектории домножается на: $\omega(s_{j+1},\ \widetilde{P}_{j+1})/(p(P_{j+1}, P_j)\, a(P_{j+1}))$

   (b) значение импульса не меняется, весовая функция траектории домножается на фактор: $1/(p(P_{j+1}, P_j)(1 - a(P_{j+1})))$, строится классическая траектория до конечного момента времени t_f.

4. Шаги (2) и (3) повторяются до тех пор, пока динамическое время траектории не достигнет своего максимального значения, т.е. $t_{j+1} \leq t_f$.

Весовая функция траектории T_i построенной по этим правилам будет иметь вид

$$\Pi(T_i) = \frac{\omega(s_{i-1},\ \widetilde{P}_{i-1})\omega(s_{i-2},\ \widetilde{P}_{i-2})\ldots\omega(s_1,\ \widetilde{P}_1)\ W^0\,(P_0)}{(1-a(P_i))p(P_i, P_{i-1})a(P_{i-1})\ldots p(P_2, P_1)a(P_1)p(P_1, P_0)p(P_0)}, \quad (1.23)$$

а вероятность построения *данной* траектории T_i будет определяться соотношением

$$p(P_iP_{i-1}\ldots P_0) = (1-a(P_i))p(P_i, P_{i-1})a(P_{i-1})\ldots p(P_2, P_1)a(P_1)p(P_1, P_0)p(P_0) \quad (1.24)$$

Теперь, чтобы получить вероятность построения *произвольной* траектории T_γ вдоль которой i раз происходит возмущение импульса, необходимо вычислить интеграл по всему фазовому пространству

$$P\{\gamma = i\} = \int\limits_\Omega \ldots \int\limits_\Omega p(P_iP_{i-1}\ldots P_0)dP_idP_{i-1}\ldots dP_0 \quad (1.25)$$

Для траекторий T_γ мы можем также ввести условную вероятность, т.е вероятность построения *отдельной* траектории, если для нее выполнено условие $\{\gamma = i\}$

$$\widetilde{p}_\gamma\,(P_iP_{i-1}...P_0|\gamma = i) = p(P_iP_{i-1}...P_0)/P\{\gamma = i\} \quad (1.26)$$

Вычисление средних от наблюдаемых величин

Можно показать, что математическое ожидание случайной величины

$$\Theta_i\left[A^{'}\right] = A^{'}(P) \times \Pi(T_i) \tag{1.27}$$

выражается через следующий интеграл или скалярное произведение в пространстве Ω

$$\begin{aligned} M\Theta_i\left[A^{'}\right] &= \int\limits_{\Omega} \ldots \int\limits_{\Omega} \Theta_i\left[A^{'}\right] \widetilde{p}_\gamma(P_i P_{i-1}\ldots P_0|\gamma = i)\, dPdP_idP_{i-1}\ldots dP_0 \\ &= \frac{\left(A^{'}(P), W^i(P)\right)}{P\{\gamma = i\}} \end{aligned} \tag{1.28}$$

Если мы построили N траекторий и N_i из них имели i возмущений импульса, то из выражения (1.28) следует, что

$$\left(A^{'}(P), W^i(P)\right) \approx \frac{P\{\gamma = i\}}{N_i} \sum_{n=1}^{N_i} \Theta_i\left[A^{'}\right]_n, \tag{1.29}$$

где $\Theta_i\left[A^{'}\right]_n$ - значение некоторой величины $\Theta_i\left[A^{'}\right]$, измеряемой на траектории по номером n. Принимая во внимание, что при $N \gg 1$

$$\frac{N_i}{N} \approx P\{\gamma = i\}, \tag{1.30}$$

окончательное выражение для квантовомеханического среднего некоторой физической величины A записывается в следующем виде

$$\begin{aligned} \langle A(t^{'})\rangle &= \left(A^{'}(P), W^0\left(P\right)\right) + \sum_{i=1}^{\infty}\left(A^{'}(P), W^i\left(P\right)\right) \approx \sum_{i=0}^{\infty}\sum_{n=1}^{N_i}\Theta_n\left[A^{'}\right] / \sum_{i=0}^{\infty}\sum_{n=1}^{N_i}\Pi(T_n) \\ &\approx \left(\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{z}\sum_{n=1}^{N_i}\Theta_n\left[A^{'}\right]\right) / \left(\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{z}\sum_{n=1}^{N_i}\Pi(T_n)\right), \quad \sum_{i=0}^{z} N_i = N \end{aligned} \tag{1.31}$$

где N - общее число траекторий, z - максимально возможное число возмущений импульса вдоль траекторий, которое определяется условием: $|\Pi(T_z)| < \varepsilon$, т.е. мы не рассматриваем траектории с весовыми функциями, которые меньше некоторого числа ε. Кроме того, в выражении (1.31) мы учли условие нормировки функции распределения: $\int dp\, dq\, W(p, q, t) = 1$.

1.1.2 Функция Вигнера в каноническом ансамбле

Временные корреляционные функции в вигнеровском представлении

Временные корреляционные функции $C_{FA}(t) = \langle F(0)A(t)\rangle$ являются наиболее интересными и важными величинами, описывающими поведение квантовых частиц в неупорядоченных системах рассеивателей, скорости химических реакций, коэффициенты переноса, равновесные и переходные спектроскопические свойства и многие другие динамические свойства. Наиболее общее операторное выражение для временной корреляционной функции в каноническом ансамбле имеет вид

$$C_{FA}(t) = Z^{-1}Tr(\hat{F}\, e^{i\hat{H}t_{\beta}^{*}/\hbar}\, \hat{A}\, e^{-i\hat{H}t_{\beta}/\hbar}), \tag{1.32}$$

где $\hat{H}$ - гамильтониан системы N частиц (1.1), $t_\beta = t - i\hbar\beta/2$, $\beta = 1/k_BT$, $\hat{F}$ и $\hat{A}$ - операторы наблюдаемых величин, $Z = Tr(e^{-\beta\hat{H}})$ - статистическая сумма. Символы Вейля $F(p,q)$ и $A(p,q)$ от операторов $\hat{F}$ и $\hat{A}$ определяются как фурье-преобразование от матричных элементов $\langle q'|\hat{F}|q''\rangle$ и $\langle q'|\hat{A}|q''\rangle$

$$A\,(q,p) = \int d\xi \exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right) \langle q + \frac{\xi}{2} \left|\hat{A}\right| q - \frac{\xi}{2}\rangle, \tag{1.33}$$

где мы ввели обозначения: $q + \frac{\xi}{2} = q', \quad q - \frac{\xi}{2} = q''$. Импульс p и координаты q, ξ являются векторами размерности $d \cdot N$, где d - размерность пространства.

Чтобы получить выражение для временной корреляционной функции в вигнеровском представлении достаточно подставить символы Вейля (1.33) в выражение (1.32)

$$\begin{aligned} C_{FA}(t) &= Z^{-1} \iint dq_1dq_2dq_3dq_4 \langle q_1|\hat{F}|q_2\rangle\langle q_2|e^{i\hat{H}t_{\beta}^{*}/\hbar}|q_3\rangle\langle q_3|\hat{A}|q_4\rangle\langle q_4|e^{-i\hat{H}t_{\beta}/\hbar}|q_1\rangle \\ &= \iint dp_1dq_1dp_2dq_2 F(p_1,q_1)A(p_2,q_2)W(p_1,q_1;p_2,q_2;t;\beta), \end{aligned} \tag{1.34}$$

где $W(p_1,q_1;p_2,q_2;t;\beta)$ - функция распределения, которая определяется через двойное преобразование Фурье от произведения недиагональных матричных элементов

$$W(p_1,q_1;p_2,q_2;t;\beta)=\frac{1}{Z(2\pi\hbar)^{2dN}}\iint d\xi_1 d\xi_2 \exp\left(\frac{ip_1\xi_1}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{ip_2\xi_2}{\hbar}\right)$$
$$\times\langle q_1-\frac{\xi_1}{2}|e^{i\hat{H}t^*_\beta/\hbar}|q_2+\frac{\xi_2}{2}\rangle\langle q_2-\frac{\xi_2}{2}|e^{-i\hat{H}t_\beta/\hbar}|q_1+\frac{\xi_1}{2}\rangle \tag{1.35}$$

Вычисляя частную производную по времени от функции распределения и используя обычную технику для матричных элементов, можно показать, что эта функция удовлетворяет системе уравнений Вигнера-Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{m}\left(p_1|\frac{\partial W}{\partial q_1}\right)+\left(F(q_1)|\frac{\partial W}{\partial p_1}\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_1 W\left(p_1-s_1,q_1;p_2,q_2;t;\beta\right)\omega\left(s_1,q_1,t\right),$$
$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{m}\left(p_2|\frac{\partial W}{\partial q_2}\right)+\left(F(q_2)|\frac{\partial W}{\partial p_2}\right)=\int\limits_{-\infty}^{\infty} ds_2 W\left(p_1,q_1;p_2-s_2,q_2;t;\beta\right)\omega\left(s_2,q_2,t\right) \tag{1.36}$$

Функция $\omega\left(s,q,t\right)$ определяется также как и в микроканоническом ансамбле.

Начальные данные для уравнения Вигнера-Лиувилля

Используя выражение (1.35) в момент времени $t=0$, находим, что начальное значение функции распределения выражается следующим интегралом

$$W_0(p_1,q_1;p_2,q_2;0;\beta)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d}Z}\iint d\xi_1 d\xi_2 \exp\left(\frac{ip_1\xi_1}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{ip_2\xi_2}{\hbar}\right)$$
$$\times\langle q_1-\frac{\xi_1}{2}|e^{-\beta\hat{H}/2}|q_2+\frac{\xi_2}{2}\rangle\langle q_2-\frac{\xi_2}{2}|e^{-\beta\hat{H}/2}|q_1+\frac{\xi_1}{2}\rangle \tag{1.37}$$

Воспользуемся теперь групповым свойством оператора плотности и высокотемпературным приближением для матричных элементов

$$e^{-\beta\hat{H}}=\left[e^{-\frac{\beta}{M}\hat{H}}\right]^M$$
$$\langle q'|\exp(-\beta\hat{H}/2M)|q''\rangle\approx\langle q'|\exp(-\beta\hat{K}/2M)|q''\rangle\,\langle q'|\exp(-\beta\hat{U}/2M)|q''\rangle, \tag{1.38}$$

чтобы представить функцию распределения $W_0(p_1, q_1; p_2, q_2; t = 0; \beta)$ в виде

$$\approx \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2d} Z} \iint dq'_1 \dots dq'_M dq''_1 \dots dq''_M \quad \exp\left\{-\sum_{m=2}^{M} K_m\right\} \exp\left\{-\sum_{m=1}^{M} U_m\right\}$$
$$\times \int d\xi_1 \langle q'_M | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q_1 + \frac{\xi_1}{2}\rangle \exp\left(\frac{ip_1\xi_1}{\hbar}\right) \langle q_1 - \frac{\xi_1}{2} | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q''_1\rangle$$
$$\times \int d\xi_2 \langle q''_M | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q_2 + \frac{\xi_2}{2}\rangle \exp\left(\frac{ip_2\xi_2}{\hbar}\right) \langle q_2 - \frac{\xi_2}{2} | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q'_1\rangle, \tag{1.39}$$

где

$$K_m = \frac{\pi}{\lambda_M^2}\{(q'_m - q'_{m-1})^2 + (q''_m - q''_{m-1})^2\}, \quad U_m = \frac{\beta}{2M}\{U(q'_m) + U(q''_m)\}$$

Здесь $M \gg 1$ - число сомножителей, использовавшихся при факторизации оператора матрицы плотности (1.38), $\lambda_M^2 = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\left(\frac{\beta}{2M}\right)$ - тепловая длина волны при температуре $\beta/2M$. Прямое вычисление последних двух сомножителей в выражении (1.39) приводит к следующему результату

$$\int d\xi_1 \langle q'_M | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q_1 + \frac{\xi_1}{2}\rangle \exp\left(\frac{ip_1\xi_1}{\hbar}\right) \langle q_1 - \frac{\xi_1}{2} | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q''_1\rangle$$
$$= \langle q'_M | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q\rangle\, \phi(p; q'_M, q_1)\, \langle q | \exp(-\beta\hat{K}/2M) | q_1\rangle, \tag{1.40}$$

где

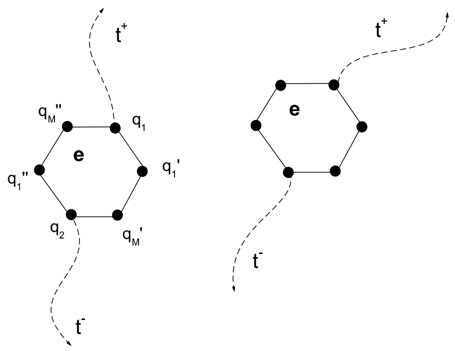
$$\phi(p; q'_M, q_1) = (2\lambda_M^2)^{d/2} \exp\left(-\frac{(p\lambda_M/\hbar + i\pi(q' - q'')/\lambda_M)^2}{2\pi}\right) \tag{1.41}$$

Окончательно для функции распределения при $t = 0$ получаем

$$W(p_1, q_1; p_2, q_2; 0; \beta) \approx$$
$$\iint dq'_1 \dots dq'_M \iint dq''_1 \dots dq''_M\, \Psi(p_1, q_1; p_2, q_2; q'_1 \dots q'_M; q''_1 \dots q''_M; 0; \beta)$$
$$\times\, \phi(p_2; q'_M, q''_1)\, \phi(p_1; q''_M, q'_1), \tag{1.42}$$

где

$$\Psi(p_1, q_1; p_2, q_2; q'_1 \dots q'_M; q''_1 \dots q''_M; \beta) = Z^{-1} \exp\left\{-\sum_{m=1}^{M+1} K_m\right\} \exp\left\{-\sum_{m=1}^{M} U_m\right\} \tag{1.43}$$



Здесь мы ввели обозначения $\{q'_0 = q_1; q''_0 = q_2\}$ и $\{q'_{M+1} = q_2; q''_{M+1} = q_1\}$. Таким образом выражение (1.42) мы представили в виде интеграла по винеровским траекториям, однако в нашем случае траектории имеют две дополнительные промежуточные точки (p_1, q_1) и (p_2, q_2). Эти точки являются начальными данными для двух динамических траекторий, определяемых уравнениями Гамильтона, которые рассматриваются в следующем разделе.

Интегральное уравнение

Интегральное уравнение для функции распределения можно вывести из системы уравнений Вигнера-Лиувилля (1.36). Определим пару динамических траекторий в "положительном" и "отрицательном" направлении оси времени

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{q}_1}{d\tau} &= \bar{p}_1(\tau)/2m; \quad \bar{q}_1(0) = q_1^0 \\
\frac{d\bar{p}_1}{d\tau} &= \frac{1}{2} F(\bar{q}_1(\tau)); \quad \bar{p}_1(0) = p_1^0 \\
\frac{d\bar{q}_2}{d\tau} &= -\bar{p}_2(\tau)/2m; \quad \bar{q}_2(0) = q_2^0 \\
\frac{d\bar{p}_2}{d\tau} &= -\frac{1}{2} F(\bar{q}_2(\tau)); \quad \bar{p}_2(0) = p_2^0
\end{aligned} \tag{1.44}$$

Подставим выражения для $F(\bar{q}_1(\tau)), \bar{p}_1(\tau), F(\bar{q}_2(\tau))$ и $\bar{p}_2(\tau)$ в систему уравнений (1.36) и вычтем второе уравнение из первого. В результате в левой части возникнет полный дифференциал от функции распределения. После домножения правой и левой части на $1/2$ и интегрирования по времени, интегральное уравнение для функции распределения примет вид

$$
\begin{aligned}
&W\left(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta\right) = \\
&= \int dp_1^0 dq_1^0\, dp_2^0 dq_2^0\, G(p_1, q_1, p_2, q_2, t; p_1^0, q_1^0, p_2^0, q_2^0, 0)\, W(p_1^0, q_1^0; p_2^0, q_2^0; 0; \beta) \\
&+ \int_0^t d\tau \int dp_1^1 dq_1^1\, dp_2^1 dq_2^1\, G(p_1, q_1, p_2, q_2, t; p_1^1, q_1^1, p_2^1, q_2^1, \tau) \\
&\times \int\limits_{-\infty}^{\infty} ds\, d\eta\, \vartheta(s, q_1^1; \eta, q_2^1; \tau)\, W(p_1^1 - s, q_1^1; p_2^1 - \eta, q_2^1; \tau; \beta),
\end{aligned} \tag{1.45}
$$

где $\vartheta(s, q_1^1; \eta, q_2^1; \tau) = \frac{1}{2}\{\omega(s, q_1^1)\delta(\eta) - \omega(\eta, q_2^1)\delta(s)\}$. Динамическая функция Грина G определяется выражением

$$
\begin{aligned}
&G(p_1, q_1, p_2, q_2, t; p_1^0, q_1^0, p_2^0, q_2^0, 0) = \delta\{p_1 - \bar{p_1}(\tau; p_1^0, q_1^0, 0)\} \\
&\quad \times \delta\{q_1 - \bar{q_1}(\tau; p_1^0, q_1^0, 0)\}\, \delta\{p_2 - \bar{p_2}(\tau; p_2^0, q_2^0, 0)\}\, \delta\{q_2 - \bar{q_2}(\tau; p_2^0, q_2^0, 0)\}
\end{aligned} \tag{1.46}
$$

Для первого члена в правой части (1.45) введем обозначение $W^0(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta)$. Этот член представляет собой вигнеровскую функцию начального состояния, которая распространяется вдоль классических траекторий (или характеристик) - решений системы уравнений (1.44). С помощью приема, который уже применялся в микроканоническом ансамбле, можно получить выражения для $\{W^1(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta), W^{(2)}(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta), \ldots\}$ и представить функцию $W\left(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta\right)$ в виде итерационного ряда (1.19). Для вычисления ряда (1.19) дадим ему вероятностную интерпретацию с помощью ансамбля динамических траекторий. Для построения траекторий будем использовать алгоритм, который описан в разделе 1.1.1. В результате интересующее нас выражение (1.34) для временных корреляционных функций запишется в виде

$$
\begin{aligned}
C_{FA}(t) &= \iint dp_1 dq_1\, dp_2 dq_2\, F(p_1, q_1)\, A(p_2, q_2)\, W(p_1, q_1; p_2, q_2; t; \beta) \\
&= \left(\phi(P) | W^0(P; \beta)\right) + \sum_{i=1}^{\infty} \left(\phi(P) | W^i(P; \beta)\right),
\end{aligned} \tag{1.47}
$$

где $(\ldots|\ldots)$ - скалярное произведение в фазовом пространстве $\{p_1, q_1, p_2, q_2\}$, функция $\phi(P) = F(p_1, q_1)A(p_2, q_2)$. Рассмотрим теперь один из способов выбора вероятностей для построения ансамбля динамических траекторий.

Квантовая динамика

Перепишем функцию $\omega(s^i, q_1^i)$ и $\omega(\eta, q_2^i)$ тождественно в виде

$$\omega(s^i, q^i) = \sigma\left(s^i, q^i\right)\chi\left(s^i, q^i\right)$$

где $\chi = |\omega|$ и $\sigma = sign\,(\omega)$. Введем также следующие функции

$$\tilde{Q}(q^i) = \int ds^i \chi\left(s^i, q^i\right) = \triangle s \sum_{s^i} \chi\left(s^i, q^i\right)$$
$$P\left(s^i, q^i\right) = \chi\left(s^i, q^i\right)/\tilde{Q}(q^i) \qquad (1.48)$$

Здесь $\triangle s$ - минимальный шаг дискретной переменной s (для других переменных будем использовать аналогичное обозначение). Сделаем замену переменных $\tau \to \tau t$ ($\tau \in [0,1]$). Функции $P\left(s^i, q_1^i\right)$ и $P\left(\eta^k, q_2^k\right)$ будем использовать для выбора величины возмущений импульса s^i и η^k. Можно показать, что рассматриваемые функции обеспечивают оптимальный выбор значений s^i и η^k, которые дают главный вклад в интегральное ядро (1.16) и в квантовые поправки вигнеровской функции (1.18). Определим теперь $a(P_i)$ - *вероятность принять возмущение импульса* в точке фазового пространства q^i как

$$a(q^i) = Q(q^i)/\left(1 + Q(q^i)\right), \qquad (1.49)$$

где

$$Q(q^i) = \tilde{Q}(q^i) t\mu$$

Здесь μ - свободный параметр, влияющий на сходимость. Как показала практика, выбор значения μ оптимален, если выполнено условие $\mu t \leq 1$. Введение вероятности $a(q^i)$ позволяет строить траектории, которые соответствуют наиболее важным членам итерационного ряда (1.19). В классическом пределе $\tilde{Q}(q^i) \to 0$ и большинство траекторий вообще не имеет возмущений импульса. В результате значение вигнеровской функции определяется, главным образом, только первым членом итерационного ряда. В противоположном случае, когда важен учет квантовых эффектов ($\tilde{Q}(q^i) \geq 1$), большинство траекторий имеет по нескольку возмущений импульса и в итерационном ряде происходит учет членов, описывающих кватовые поправки высокого порядка. Рассмотрим теперь оптимальный выбор начальных данных для траекторий.

Обозначим через $P^0 = \{p_1^0, q_1^0; p_2^0, q_2^0\}$ начальную точку траекторий, стартующих вперед и назад по времени, а также введем *вероятность выбора начального состояния* в фазовом пространстве через модуль функции распределения

$$p(P^0) = \left|W(P^0;0;\beta)\right|/Q^f$$

$$Q^f = \int dP^0 \left|W(P^0;0;\beta)\right| = \triangle P^0 \sum_{P^0} \left|W(P^0;0;\beta)\right|$$

В соответствии с выражениями (1.42) начальную функцию распределения $W(P^0;0;\beta)$ можно представить в виде винеровских интегралов по траекториям, которые можно вычислить с помощью специальной техники Монте-Карло (см. раздел 1.2). При выборе начального состояния с вероятностью $p(P^0)$, весовой функции траектории приписывается значение $sign(W(P^0;0;\beta))/p(P^0)$.

Теперь определим вероятности перехода $p(P_i, P_{i+1})$ между точками фазового пространства. Переход в новую точку фазового пространства

$$\begin{aligned} P^{i+1} = \{&\bar{p}_1(\tau_1^{i+1};p_1^i,q_1^i,\tau_1^i) + s^{i+1}, \bar{q}_1(\tau_1^{i+1};p_1^i,q_1^i,\tau_1^i), \\ &\bar{p}_2(\tau_2^{i+1};p_2^i,q_2^i,\tau_2^i) + \eta^{i+1}, \bar{q}_2(\tau_2^{i+1};p_2^i,q_2^i,\tau_2^i)\} \end{aligned}$$

из точки $P_i = \{p_1^i, q_1^i, \tau_1^i, p_2^i, q_2^i, \tau_2^i\}$ полностью определен уравнениями Гамильтона (1.44), начальными $\{\tau_1^i, \tau_2^i\}$ и конечными $\{\tau_1^{i+1}, \tau_2^{i+1}\}$ моментами времени, а также возмущениями импульса s^{i+1}, η^{i+1}.

Рассмотрим последовательность моментов времени

$$0 \le \tau^1 \le \tau^2 \ldots \le \tau^i \le \tau^{i+1} \le 1$$

в которые происходит возмущение импульса траектории. Эту последовательность можно построить используя, например, условную вероятность вида

$$r\left(\tau^i\right) = 1/\tau^{i+1}$$

Случайная величина ξ_i с однородным распределением в интерале $(0, \tau_{j+1})$ принимает конечное значение, если величина ξ_{i+1} уже имеет значение of τ^{i+1}. Полная вероятность для рассматриваемой последовательности будет определяться выражением

$$r\left(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_i, \tau_{i+1}\right) = r\left(\tau_{i+1}\right) r\left(\tau_i|\tau_{i+1}\right) \ldots r\left(\tau_1|\tau_{i+1}, \ldots, \tau_3, \tau_2\right)$$

где $r\left(\tau_{i+1}\right) = 1, r\left(\tau_i|\tau_{i+1}\right) = 1/\tau_{i+1}, \ldots, r\left(\tau_1|\tau_{i+1}, \ldots, \tau_3, \tau_2\right) = 1/\tau_2$. Случайные величины ξ_i можно получить из случайных величин γ_i однородно распределенных в интервале $(0,1)$ с помощью соотношений

$$\xi_{i+1} = \gamma_{i+1}, \quad \xi_i = \xi_{i+1}\gamma_i, \quad \ldots, \quad \xi_1 = \xi_2\gamma_1$$

В компьютерных вычислениях удобнее использовать дискретные переменные, т.е. если используется минимальный временной шаг $\triangle\tau$, тогда рекурентные соотношения можно переписать в виде

$$\xi_1 = \triangle\tau, \quad \xi_2 = \xi_1/\gamma_1, \quad \ldots, \quad \xi_i = \xi_{i-1}/\gamma_{i-1}, \quad \xi_{i+1} = \xi_i/\gamma_i$$

Эти соотношения можно в свою очередь использовать для генерации последовательности $\tau_1, \ldots, \tau_i, \tau_{i+1}$ необходимой для построения траектории T_i. Последовательность можно оборвать, если для некоторого i будет выполнено: $\xi_i \geq 1$.

В результате вероятность перехода $p(P_i, P_{i+1})$ запишется в виде

$$p(P_i, P_{i+1}) = r(\tau_i)\, a(q^i) = \frac{1}{\tau_{i+1}}\, a(q^i) \tag{1.50}$$

Таким образом, мы имеем все необходимые вероятности, чтобы построить пару траекторий $T_{i,n}$

$$\begin{aligned} T_{i,n} = \{&(P_1^0 \to P_1^1 \to \ldots \to P_1^i \to P_1^{i+1} = P_1), \\ &(P_2^0 \to P_2^1 \to \ldots \to P_2^n \to P_2^{n+1} = P_2)\}, \end{aligned}$$

распространяющихся в разных временных направлениях. Будем считать, что вдоль траекторий произошло, соответственно, i и n возмущений импульса, а на $i+1$ и $n+1$ раз попытки возмущения импульса были отвергнуты. С помощью введеных выше вероятностей перепишем выражения для *вероятности построения* траектории (1.23) и ее *весовой функции* (1.24) в следующем виде

$$\begin{aligned} p(T_{i,n}) =& \{1 - a(q_1^i)\}\{1 - a(q_2^n)\}\, r(\tau_1^{i+1})\, r(\tau_2^{n+1}) \\ &\times \prod_{j=0}^{i} \left[P\left(s^{j+1}, q_1^{j+1}\right) r(\tau_1^j)\, a(q_1^j)\right] \\ &\times \prod_{k=0}^{n} \left[P\left(\eta^{k+1}, q_2^{k+1}\right) r(\tau_2^k)\, a(q_2^k)\right] \end{aligned} \tag{1.51}$$

$$
\begin{aligned}
\Pi(T_{i,n}) = &\{1+Q(q_1^i)\}\{1+Q(q_2^n)\} \\
&\times \prod_{j=0}^{i}\left[\sigma\left(s^{j+1},q_1^{j+1}\right) t\tilde{Q}(q_1^{j+1})/r(\tau_1^j)\, a(q_1^j)\right] \\
&\times \prod_{k=0}^{n}\left[\sigma\left(\eta^{k+1},q_2^{k+1}\right) t\tilde{Q}(q_2^{k+1})/r(\tau_2^k)\, a(q_2^k)\right],
\end{aligned} \tag{1.52}
$$

где для промежуточных точек τ_1^{i+1} $(\tau_1^i \le \tau_1^{i+1} \le 1)$ и τ_2^{n+1} $(\tau_2^n \le \tau_2^{n+1} \le 1)$ мы предполагаем, что $r(\tau_1^{i+1}) = 1$, $r(\tau_2^{n+1}) = 1$ и $r(\tau_1^i) = 1/\tau_1^{i+1}$, $r(\tau_2^{n+1}) = 1/\tau_2^{n+1}$.

Таким образом для произвольной функции $\phi(p_1,q_1;p_2,q_2) = A(p_1,q_1)\,F(p_2,q_2)$ в пространстве траекторий $T_{i,n}$ математическое среднее (1.31) может быть вычислено как среднее по ансамблю N динамических траекторий

$$
C_{FA}(t) = M\{\alpha(\phi;T_{i,n})\} \approx \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\alpha(\phi;T_{i,n}), \tag{1.53}
$$

$$
\alpha(\phi;T_{i,n}) = F(p_1,q_1)A(p_2,q_2)\,W(p_1,q_1;p_2,q_2;0;\beta)\,\Pi(T_{i,n}), \tag{1.54}
$$

$$
\lim_{N\to\infty}\sum_{l=1}^{N} \equiv \sum_{p_1,q_1}\sum_{p_2,q_2}\sum_{i,n=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}\sum_{k=0}^{n}\sum_{\tau_1^j,\tau_2^k}\sum_{s^j,\eta^k}
$$

Траектории $T_{i,n}$ выбираются с вероятностью $p(T_{i,n})$. Не смотря на то, что поведение функции $F(p_1,q_1)A(p_2,q_2)$ в фазовом пространстве может быть произвольным, функция распределения $W(p_1,q_1;p_2,q_2;0;\beta)$ экспоненциально убывает вне компактной области, имеющей размер порядка тепловой длины волны λ $(\lambda^2 = 2\pi\hbar^2\beta/2m)$. По этой причине начальное состояние

$$
\{p_1,q_1,\tau_1^0=0,s^0=0;p_2,q_2,\tau_2^0=0,\eta^0=0;q_1',\ldots,q_M';q_1'',\ldots,q_M''\}
$$

при $t=0$ может выбираться с помощью процедуры Монте-Карло, обеспечивающей выбор координат и импульсов именно из этой компактной области. Только траектории, которые выходят из этой области, дают главный вклад в функцию $C_{FA}(t)$.

1.2 Метод Монте-Карло в квантовой статистике

После того как в 1953 году Метрополис [31] применили метод Монте-Карло в каноническом ансамбле для расчета состояния двумерной системы твердых дисков, этот метод получил широкое применение на практике. В настоящее время метод Монте-Карло и его различные варианты (кинетический, квантовый, вариационный и т.д.) используются для решения различных задач физики, химии, биологии.

В статистической физике классических систем хорошо известны выражения, которые непосредственно связывают искомые термодинамические величины с потенциалом межчастичного взаимодействия, температурой и плотностью системы. Иной является ситуация для квантовых систем. Наиболее употребительные выражения для статистической суммы в квантовой статистике не подходят для вычислений методом Монте-Карло. Поэтому прежде чем применять метод Монте-Карло в квантовой статистике, необходимо представить термодинамические величины для квантовых систем в виде замкнутых выражений, пригодных для вычислений в рамках метода Монте-Карло, т.е. в виде сумм и интегралов от явных функций температуры, плотности и потенциала взаимодействия частиц друг с другом, при этом какие-либо ограничения на гамильтониан системы накладываться не должны.

1.2.1 Матрица плотности системы неразличимых частиц

Термодинамика квантовомеханической системы полностью определена, если известна многочастичная матрица плотности ρ. Оператор матрицы плотности определяется выражением

$$\rho = \sum_i |\phi_i\rangle e^{-\beta E_i} \langle\phi_i| = e^{-\beta H} \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \tag{1.55}$$

где H - оператор Гамильтониана, $|\phi_i\rangle$ - вектор состояния, соответствующий волновой функции ϕ_i. В силу свойств полноты системы собственных состояний оператор $\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ представляет собой единичный оператор и, следовательно, $\rho = e^{-\beta H}$. Эта форма, не зависящая явно от представления, иногда бывает удобной для вычислений. В операторном представлении термодинамическое среднее от произвольного оператора O записывается в виде $\langle O\rangle = tr\{O \exp^{-\beta H}\}/Z$. Рассмотрим канонический ансамбль, в котором фиксированы число частиц N, температура T и объем V. Перепишем матрицу плотности в координатном представлении

$$\rho(R, R'; \beta) = \langle R|e^{-\beta H}|R'\rangle = \sum_i \phi_i^*(R)\phi_i(R') \exp^{-\beta E_i} \tag{1.56}$$

Если пространство имеет размерность d, а система содержит N частиц, то $R = (r_1, r_2, \ldots, r_N)$ - вектор размерности $\{d \cdot N\}$. Учтем теперь в выражении для матрицы плотности неразличимость частиц и их статистику. Для систем Бозе (Ферми) в выражении для матрицы плотности необходимо ограничиться суммированием только по симметричным (антисимметричным) волновым функциям $\phi_i(R)$. Многочастичная волновая функция $\phi(R)$ этих систем обладает следующим свойством

$$P\phi(R)_{B/F} = \frac{1}{N!}\sum_P (\pm 1)^{\delta P}\phi_i(PR), \tag{1.57}$$

где $PR = (r_{Pr_1}, r_{Pr_2}, \ldots, r_{Pr_N})$ - действие оператора перестановки на индексы частиц, δP - четность перестановки. Далее, чтобы избежать ненужных усложнений, ограничимся случаем Ферми систем и будем развивать соответствующий формализм считая, что рассматриваемые частицы фермионы.

Запишем статистическую сумму системы N фермионов со спинами σ_i

$$Z_F = \frac{1}{N!}\sum_\alpha \sum_P (-1)^{\delta P} \int dR \left\langle R, \chi_\alpha \right| e^{-\beta \hat{H}} \left| PR, \chi_{P\alpha} \right\rangle,$$

где R - координатная, χ_α - спиновая часть волновой функции, $\alpha = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N)$ - набор спиновых переменных. Если пренебречь взаимодействием магнитного момента спина с магнитным полем токов, создаваемых центром тяжести заряженного электрона, то в этом приближении волновая функция записывается в виде, который соответствует разделению переменных

$$|R, \chi_\alpha\rangle = |R\rangle\,|\chi_\alpha\rangle$$

Далее воспользуемся групповым свойством оператора плотности

$$\rho = e^{-\beta\hat{H}} = \left[e^{-\frac{\beta}{M+1}\hat{H}}\right]^{M+1}$$

и перепишем статистическую сумму в следующем виде

$$
\begin{aligned}
Z_F &= \frac{1}{N!}\sum_{\alpha}\sum_{P}(-1)^{\delta P}\int\ldots\int dR\,dR^{(1)}\ldots dR^{(M)}\langle\chi_\alpha|\langle R|e^{-\frac{\beta}{M+1}\hat{H}}|R^{(1)}\rangle\ldots\\
&\times\langle R^{(M-1)}|e^{-\frac{\beta}{M+1}\hat{H}}|R^{(M)}\rangle\langle R^{(M)}|e^{-\frac{\beta}{M+1}\hat{H}}|PR\rangle|\chi_{P\alpha}\rangle,
\end{aligned}
$$

где введено интегрирование по промежуточным переменным $\{R^{(1)},\ldots,R^{(M)}\}$. Теперь статистическая сумма системы выражается через многократный интеграл от произведения недиагональных матричных элементов при новой температуре $\tau=\beta/(M+1)$, которая в $M+1$ раз выше исходной. Используя высокотемпературное приближение

$$
\langle R^{(i)}|e^{-\tau\hat{H}}|R^{(i+1)}\rangle\approx\langle R^{(i)}|e^{-\tau\hat{K}}e^{-\tau\hat{V}}e^{-\frac{\tau^2}{2}[\hat{K},\hat{V}]}|R^{(i+1)}\rangle \tag{1.58}
$$

$$
\approx\langle R^{(i)}|e^{-\tau\hat{K}}e^{-\tau\hat{V}}|R^{(i+1)}\rangle(1-\frac{o^2}{2})\approx e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R^{(i+1)}-R^{(i)})^2}e^{-\tau V(R^{(i)})},
$$

где $\hat{K},\hat{V}$- операторы кинетической и потенциальной энергии, $o\sim 1/(M+1)$ - ошибка приближения, $\lambda_M^2=\frac{2\pi\hbar^2\beta}{m_e(M+1)}$ - тепловая длина волны, можно получить достаточно точное приближение для Z_F. Для этого подставим высокотемпературное приближение для всех недиагональных элементов в правую часть выражения для статистической суммы

$$
\begin{aligned}
Z_F &= \frac{1}{N!\lambda_M^{d(M+1)N}}\int\ldots\int dR\,dR^{(1)}\ldots dR^{(M)}e^{-\tau U(R)}e^{-\tau U(R^{(1)})}\ldots e^{-\tau U(R^{(M)})}\\
&\times e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R-R^{(1)})^2}e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R^{(1)}-R^{(2)})^2}\ldots e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R^{(M-1)}-R^{(M)})^2}\\
&\times\sum_{\alpha}\sum_{P}(-1)^{\delta P}e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R^{(M)}-PR)^2}\langle\chi_\alpha|\chi_{P\alpha}\rangle
\end{aligned} \tag{1.59}
$$

Для случая, когда оператор спина $\hat{S}$ не входит в гамильтониан, для спиновой части волновой функции выполняются следующие соотношения

$$
\begin{aligned}
|\chi_\alpha\rangle &= |\chi_{\sigma_1}\rangle\,|\chi_{\sigma_2}\rangle\ldots|\chi_{\sigma_N}\rangle\,,\\
\langle\chi_\alpha|\chi_{P\alpha}\rangle &= \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_N}\chi_{\sigma_1}(s_1)\chi^*_{\sigma_{P1}}(s_1)\ldots\chi_{\sigma_N}(s_N)\chi^*_{\sigma_{PN}}(s_N)\\
&= \delta_{\sigma_1\sigma_{P1}}\delta_{\sigma_2\sigma_{P2}}\ldots\delta_{\sigma_N\sigma_{PN}}
\end{aligned}
$$

Последний сомножитель в выражении (1.59) представляет собой детерминант некоторой матрицы

$$\sum_{\alpha}\sum_{P}(-1)^{\delta P}e^{-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(R^{(M)}-PR)^2}\langle\chi_\alpha|\chi_{P\alpha}\rangle = \sum_{\alpha=(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N)} \det\|\varphi_{ij}\quad\delta_{\sigma_i\sigma_j}\|,$$

элементы которой имеют вид

$$\varphi_{ij} = \exp(-\frac{\pi}{\lambda_M^2}(r_i^{(M)}-r_j)^2), \quad \{i,j=1,\ldots,N\}.$$

Окончательное выражение для Z_F убодно переписать в виде

$$\begin{aligned} Z(\beta)_F &= \frac{1}{N!}\int dR\ldots\int dR^{(M)}\exp\left\{-\sum_{m=1}^{M}S_m\right\}\sum_{\alpha} det||\varphi_{ij}\quad\delta_{\sigma_i\sigma_j}||, \\ S_m &= \frac{(M+1)m_e}{2\hbar^2\beta}(R^{(m+1)}-R^{(m)})^2+\frac{\beta}{M+1}V(R^{(m)}), \\ \varphi_{ij} &= \frac{(M+1)m_e}{2\hbar^2\beta}(r_i^{(M)}-r_j)^2 \end{aligned} \tag{1.60}$$

Этому выражению можно дать интерпретацию классического конфигурационного интеграла, где вместо классической потенциальной энергии деленной на k_BT стоит действие S_m. Можно сказать, что полученная формула соответствует *интегралу по всем возможным траекториям во мнимом времени* $t \to i\hbar\beta$, *которые выходят из точки* R, *заканчиваются в точке* PR, *и проходят через точки* $R^{(m)}$ *в моменты времени* $(m\cdot\tau)$, $m=\overline{1,M}$.

1.2.2 Термодинамические средние и эстиматоры для измеряемых величин

Термодинамические свойства и статические свойства диагональные в координатном представлении можно получить из производных функции Z_F и шпура матрицы плотности $\rho(R,R;\beta)$. Рассмотрим выражение для внутренней энергии

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}lnZ_F = -\frac{1}{Z_F}\frac{\partial Z_F}{\partial\beta} \tag{1.61}$$

С учетом (1.60) расчет энергии сводится к вычислению термодинамических средних

$$\begin{aligned} E =& E_{kin} + \left\langle \tau \sum_{m=1}^{M} V(R^{(m)} \right\rangle - \left\langle |\phi_{ij}|^{-1} \frac{\partial\, |\phi_{ij}|}{\partial \beta} \right\rangle, \\ E_{kin} =& \frac{d(M+1)N}{2\beta} - \left\langle \sum_{m=1}^{M} \frac{(M+1)m_e}{2\hbar^2\beta^2} (R^{(m+1)} - R^{(m)})^2 \right\rangle \end{aligned} \tag{1.62}$$

где $|\phi_{ij}| = \sum_\alpha det||\varphi_{ij} \;\; \delta_{\sigma_i\sigma_j}||$. Главный недостаток этого термодинамического эстиматора заключается в том, что кинетическая энергия выражается как разность двух больших чисел при $M \gg 1$. Из-за этого дисперсия эстиматора кинетической энергии с увеличением M растет и представление матрицы плотности через высокотемпературное разложение теряет свои преимущества из-за потери точности вычислений. Решение данной проблемы заключается в использовании вириального эстиматора энергии [3]. В настоящей работе используется оригинальный метод вычисления эстиматоров. С помощью него были получены эстиматоры всех основных термодинамических величин: энергии, теплоемкости, давления и т.д. Все эстиматоры не обладали описанным выше недостатком. Суть метода заключается во введении пространственной меры зависящей от температуры

$$r^{(m)} = r^{(0)} + \sum_{\tau=1}^{m} \lambda_M \xi^{(\tau)} \tag{1.63}$$

Здесь $\xi^{(\tau)}$ - набор единичных векторов. Рассмотрим, в качестве примера, как будет выглядеть, после произведенной замены переменных, эстиматор внутренней энергии N ферминов в гармонической ловушке с частотой ω и центром в r_0, отталкивающихся по кулоновскому закону

$$E = \langle E_{kin} \rangle + \langle E_{pot} \rangle - \left\langle |\phi_{ij}|^{-1} \frac{\partial\, |\phi_{ij}|}{\partial \beta} \right\rangle, \tag{1.64}$$

$$\begin{aligned} E_{kin} =& \frac{d\,N}{2\beta} + \frac{m_e\omega^2}{2M} \sum_{i=1}^{N} \sum_{m=1}^{M} (r_i^{(m)} - r_0 | \lambda_M \sum_{\tau=1}^{m} \xi^{(\tau)}) + \\ & + \frac{e^2}{2\epsilon M} \sum_{i<j} \sum_{m=1}^{M} \frac{(r_i^{(m)} - r_j^{(m)} | \sum_{\tau=1}^{m} \{\xi_i^{(\tau)} - \xi_i^{(\tau)}\})}{(r_i^{(m)} - r_j^{(m)})^3} \end{aligned} \tag{1.65}$$

$$E_{pot} = \frac{m_e\omega^2}{2M}\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=1}^{M}(r_i^{(m)} - r_0)^2 + \frac{e^2}{\epsilon M}\sum_{i<j}\sum_{m=1}^{M}\frac{1}{|r_i^{(m)} - r_j^{(m)}|}, \qquad (1.66)$$

где $(\ldots|\ldots)$ - скалярное произведение в пространстве размерности d. Стоит отметить, что теперь в выражении для кинетической энергии стоит разность членов, каждый из которых принимает конечные значения даже при $M \to \infty$. Рассмотрим теперь способ вычисления конфигурационных интегралов, которые стоят в выражении (1.60).

1.2.3 Вычисление интегралов по траекториям. Алгоритм Метрополиса

Полное конфигурационное пространство, по которому производится интегрирование, разбивается на пространство координат траекторий $\{r_i, r_i^{(1)}, \ldots, r_i^{(M)}\}$, представляющих отдельные частицы i, и пространство $N!$ перестановок $\{P\}$. Основная идея метода Монте-Карло заключается в рассмотрении последовательности состояний (конфигураций) $s_1, s_2, \ldots, s_N$, которые образуют траекторию цепи Маркова. Для этого вводятся элементы переходной стохастической матрицы $P(s \to s')$ (переход из состояния $s \to s'$), которые удовлетворяют соотношениям

$$P(s \to s') > 0, \quad \sum_{s'} P(s \to s') = 1 \qquad (1.67)$$

Если состояния $A_{s'}$ выбираются с вероятностями $P(s \to s')$, то формула для вычисления среднего $\langle A \rangle$ в силу центральной предельной теоремы теории вероятности имеет следующий вид

$$\langle A \rangle = \lim_{L\to\infty} \frac{\frac{1}{L}\sum\limits_{s'=1}^{L} A_{s'}/P(s \to s')}{\frac{1}{L}\sum\limits_{s'=1}^{L} 1/P(s \to s')} \qquad (1.68)$$

где L - длина цепи Маркова. Величина дисперсии выражения, которое стоит в правой части, определяет погрешность и может быть оценена в процессе вычислений. Не смотря на то, что порядок убывания погрешности $O(N^{-1/2})$ представляется недостаточно высоким для точных вычислений, существуют различные приемы уменьшения дисперсии. В стандартной процедуре Метрополиса [31] вероятности $P(s \to s')$ выбираются пропорциональными подинтегральному выражению. Для статистической суммы Z_F(1.60) удобен следующий способ введения абсолютных

$$p_s = \frac{e^{-\sum\limits_{m=1}^{M} S_m(s)} |\phi_{ij}(s)|^{-1} \dfrac{\partial\, |\phi_{ij}(s)|}{\partial \beta}}{Z_F}, \quad p_{s'} = \frac{e^{-\sum\limits_{m=1}^{M} S_m(s')} |\phi_{ij}(s')|^{-1} \dfrac{\partial\, |\phi_{ij}(s')|}{\partial \beta}}{Z_F}$$

и переходных вероятностей

$$P(s \to s') = \frac{p_{s'}}{p_s} = e^{-\left(\sum\limits_{m=1}^{M} \{S_m(s') - S_m(s)\}\right)} \times \frac{|\phi_{ij}(s')|^{-1} \dfrac{\partial\, |\phi_{ij}(s')|}{\partial \beta}}{|\phi_{ij}(s)|^{-1} \dfrac{\partial\, |\phi_{ij}(s)|}{\partial \beta}}, \tag{1.69}$$

где статистическая сумма Z_F обеспечивает нормировку вероятностных функций, s, s' - элементы конфигурационного пространства:

$$s = \{R, R^{(1)}, \dots, R^{(M)}; \sigma_1, \dots, \sigma_N\}, \quad s' = \{R', R'^{(1)}, \dots, R'^{(M)}; \sigma'_1, \dots, \sigma'_N\} \tag{1.70}$$

Отметим еще раз связь полученных выражений с моделированием классических систем: в классическом пределе, функция действия $\sum_{m=1}^{M} S_m(s) \to U(R)/k_B T$, а приведенные формулы переходят в хорошо известные выражения классического метода Монте-Карло.

Большинство современных методов интегрирования по траекториям используют различные обобщения алгоритма Метрополиса. Эти модификации стандартной процедуры сохраняют все необходимые свойства Марковского процесса и к ним также применима центральная предельная теорема (1.68). Чтобы построить марковскую цепь необходимо задать *правила перехода* $P(s \to s')$, по которым будет происходить случайное блуждание в пространстве конфигураций. Правила перехода должны быть *эргодическими* и удовлетворять условию детального баланса (равновесия): *вероятность перехода из состояния s в состояние s' должна равняться вероятности обратного перехода*

$$p_s P(s \to s') = p_{s'} P(s' \to s) \tag{1.71}$$

Правила перехода записываются в виде произведения априорной вероятности выбора новой конфигурации $T(s \to s')$ и вероятности принять это новое состояние взамен старого $A(s \to s')$:

$$P(s \to s') = T(s \to s')A(s \to s')$$

В стандартном методе Метрополиса вероятность $T(s \to s') = 1$ внутри некоторого куба единичного размера, в вне этого куба $T(s \to s') = 0$. Напротив, в обобщенном методе [32] доступен широкий класс распределений $T(s \to s')$ и решение о переходе системы в новое состояние принимается с вероятностью

$$A(s \to s') = \min\left[1, \frac{T(s' \to s)p_{s'}}{T(s \to s')p_s}\right] \tag{1.72}$$

Легко проверить, что это выражение удовлетворяет условию детального баланса (1.71). Для принятия решения о переходе в новое состояние вероятность $A(s \to s')$ сравнивается со случайным числом ξ равномерно распределенным в интервале $[0, 1]$:

$$\begin{cases} A(s \to s') \leq \xi, & \text{система остается в старом положении,} \\ A(s \to s') > \xi, & \text{система переходит в новое состояние.} \end{cases}$$

Таким образом, если переход в новое состояние не принят, то система остается в старом положении по крайней мере еще на один шаг марковской цепи.

Для того, чтобы повысить эффективность вычисления термодинамических средних необходима организация такого типа движения в конфигурационном пространстве, чтобы исследовать большую его часть за наименьшее время. Например, в ряде работ было показано, что эффективность расчетов можно повысить, используя многосеточный метод (“Мультигрид” [33]) и его модификации: “Многоуровневый метод Монте-Карло” [34], “Метод Монте-Карло с использованием коэффициентов Фурье для отрезков траекторий” [35]. Рассмотрим основные идеи “Многоуровневого метода Монте-Карло”, который использовался в настоящей работе.

Предположим мы рассматриваем траекторию в $m = 2^{l_0-1}$ промежуточных временных слоях $\{R^{(i)}, R^{(i+1)}, \ldots, R^{(i+m)}\}$, что соответствует температурному интервалу

$$\tilde{\beta}_0 = \tau \times 2^{l_0-1} \tag{1.73}$$

Мы фиксируем конечные положения отрезка траектории - точки $R^{(i)}, R^{(i+m)}$. Наша задача состоит в построении нового отрезка траектории, положение которого определяется новыми координатами $\{R'^{(i+1)}, \ldots, R'^{(i+m-1)}\}$. Построение этого отрезка лучше всего начать с его центра $R^{(i+m/2)}$, так как он дальше всего находится от конечных точек и может испытывать наибольшие флуктуации потенциальной энергии. В частности, значение потенциальной энергии сильно возрастает, если положение $r_{n_1}^{(i+m/2)}$ одной из частиц n_1 оказывается поблизости от координаты $r_{n_2}^{(i+m/2)}$ какой-то другой частицы n_2, т.е. если траектории двух частиц сильно сближаются или пересекаются. В том случае, если бы построение интервала траектории началось с одного из его концов, сближение траекторий обнаружилось бы слишком поздно и уже построенный отрезок траектории пришлось бы строить заново в другом, случайно выбранном направлении. Имея ввиду это существенное замечание, новый интервал траектории лучше строить с использованием 'the Levy construction' (рекурсивное уменьшение длины интервала в два раза). При этом число новых координат интервала каждый раз увеличивается в два раза и они группируются в блоки, соответствующие определенной температуре. Например, блок уровня l содержит 2^{l-1} координат, а новый отрезок траектории разбит на температурные интервалы длиной

$$\tilde{\beta}_l = \tau \times 2^{l_0-l-1} = \tilde{\beta}_0/2^l \tag{1.74}$$

Координаты на разных уровнях l выбираются и двигаются в следующей последовательности:

- s_0 - начальные координаты $\{R^{(i)}, R^{(i+1)}, \dots, R^{(i+m)}\}$.
- s_1 - изменяются координаты на временном слое $i + m/2$.
- s_2 - изменяются координаты на временных слоях $i + m/4, i + 3m/4$.
- $\dots$
- s_{l_0} - изменяются координаты на временных слоях $i+1, i+3, \dots, i+m-1$.

Теперь для каждого уровня $l \le l_0$ необходимо определить действие. Оптимальным выбором было бы действие из выражения (1.60), полученное путем интегрирования по всем переменным более высоких уровней. Однако это достаточно трудоемкая процедура и можно поступить проще, введя по определению, что *"действие" π_l равно произведению матриц плотности, взятых при температуре $\tilde{\beta}_l$*. Так например, "действие" на первом уровне $l = 1$ можно определить как

$$\pi_1(R_{i+m/2}) = \rho(R_i, R_{i+m/2}; \tilde{\beta}_0/2)\rho(R_{i+m/2}, R_{i+m}; \tilde{\beta}_0/2), \tag{1.75}$$

где для матриц плотности $\rho(R_i, R_{i+m/2}; \tilde{\beta}_0/2)$ будем использовать аппроксимацию (1.58) при температуре $\tilde{\beta}_0/2$. На самом деле нам не нужно знать точное значение "действия" π_l на всех уровнях кроме последнего. Нам просто нужна любая функция, которая чувствительна к перекрытию или сближению траекториий. Мы свободны в выборе функциональной зависимости "действия" π_l. В конечном счете, это будет влиять лишь на скорость сходимости наших вычислений. Однако на последнем уровне $l = l_0$ в выражения для переходных вероятностей $P(s \to s')$ обязательно должно войти действие, которое записано с точностью первоначального высокотемпературного разложения $[\tau = \beta/(M+1)]$ матрицы плотности (1.60).

Для движения траекторий на временных слоях удобно использовать обобщенный алгоритм Метрополиса, определив вероятность выбора нового положения траектории на уровне l как

$$T_l(s_l \to s_l') \equiv T_l(s_l') = \pi_l(s_l')/\pi_l(s_l), \tag{1.76}$$

а вероятность принять это положение взамен старого как

$$A_l(s_l \to s_l') \equiv A_l(s_l') = \min\left[1, \frac{T_l(s_l)\pi_l(s_l')\pi_{l-1}(s_{l-1})}{T_l(s_l')\pi_l(s_l)\pi_{l-1}(s_{l-1}')}\right] \tag{1.77}$$

Мы сравниваем вероятность $A_l(s_l')$ со случайным числом $\xi \in [0, 1]$, и если оказывается, что $A_l(s_l') > \xi$, то осуществляется переход на следующий уровень $l + 1$. Новое положение траектории принимается только в том случае, если решение о переходе в новое состояние было принято на каждом уровне $l = 1, \ldots, l_0$. Если же на одном из уровней новое положение было отвергнуто (т.е. $A_l(s_l') < \xi$), то траектория остается в старом положении и выбирается следующий тип движения.

Перечислим теперь использовавшиеся типы движений траекторий и их координат на промежуточных временных слоях l. В ходе расчетов применялось три типа (способа) движений траекторий:

1. Движение всей траектории как целого, т.е. меняются координаты на всех промежуточных слоях $\{m = 1, \ldots, M + 1\}$. При этом происходит изменение детерминанта $det||\varphi_{ij} \quad \delta_{\sigma_i\sigma_j}||$ в выражении (1.60).

2. Деформация отдельной части траекторий на временных слоях $\{m = i, \ldots, i + n\}$, $n = 2^{l_0-1}$, где l_0 принимает одно из возможных значений $l_0 = 1, 2, 3, \ldots$ ("Многоуровневый метод Монте-Карло").

3. Осуществление одной из $N!$ перестановок, при котором траектории могут не только заканчиваться на себе $\{r_{Pi} = r_i\}$, но и на местоположении других частиц $\{r_{Pi} = r_j,\ i \neq j\}$ (для этого также использовался "Многоуровневый метод Монте-Карло"). При этом типе происходит изменение детерминанта $det||\varphi_{ij} \quad \delta_{\sigma_i\sigma_j}||$ в выражении (1.60).

Изменение спиновых переменных $\{\sigma_1, \ldots, \sigma_N\}$ не рассматривались, так как вычисления проводились при фиксированном значении полного спина $S = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i = 0(1/2)$ для четного (нечетного) числа фермионов, т.е. рассматривался случай неполяризованной системы.

Глава 2

Исследование транспортных свойств электронных систем методом квантовой молекулярной динамики

2.1 Прохождение волновых пакетов через туннельные барьеры

В последнее время, в связи с развитием наноэлектроники важную роль приобретает изучение туннелирования в наноструктурах. В ряде случаев, например, при изучении воздействия фемтосекундных световых импульсов на связанные ямы возникает задача о туннелировании волновых пакетов через потенциальный барьер. Эта задача важна и при возможном использовании сканирующего туннельного микроскопа, облучаемого фемтосекундными импульсами, для изучения наноструктур с одновременно высоким пространственным и временным разрешением [36]. Интересен также вопрос о времени туннелирования при ионизации атома водорода сверхкороткими лазерными импульсами, а также туннелирования вызванного воздействием лазерного импульса на низколежащие энергетические уровни ядра. В настоящей работе исследуется не менее интересный вопрос о продолжительности туннелирования в наноструктурах. В этом случае определение времени туннелирования представляет практический интерес, так как это позволяет оценивать быстродействие полупроводниковых элементов. В этой связи задача, которую мы рассматриваем, такова: допустим с помощью лазерного импульса был создан волновой пакет возбужденного электрона недалеко от туннельного барьера, спрашивается, через какое время протуннелировавшая часть пакета появится за барьером. Появление волнового пакета можно было бы зарегистрировать путем изучения локальных изменений оптических свойств, используя пробные ультракороткие импульсы.

Интересно, что при прохождении пакета через туннельный барьер обнаруживается ряд эффектов, которые отсутствуют в стационарном случае. Время туннелирования пакета в общем случае определяется не обратной вероятностью стационарного туннелирования, а связано с довольно сложными процессами: изменением формы и поведением пакета внутри барьера. Более того, время прохождения через барьер неоднозначно зависит от измеряемых величин, т.е. от типа эксперимента.

Исследование вопроса о времени пребывания туннелирующей частицы под барьером началось довольно давно [37]-[39] и в настоящее время предложено много как теоретических, так и экспериментальных способов измерения времени туннелирования. Существуют, например, подходы, где в качестве наблюдаемой величины выбирается пик пакета или средняя координата ("центроид"), а время отражения или прохождения определяется их эволюцией. Однако, как было показано в [40] и последующих работах, падающий на потенциальный барьер пик волнового пакета не переходит в пик прошедшей волны. В работе [41] был рассмотрен случай, в котором из-за дисперсии волнового пакета в импульсном пространстве, высокоэнергетические компоненты достигали барьера раньше остальных. Так как вероятность туннелирования растет с увеличением энергии, эти компоненты давали главный вклад в прошедшую через барьер часть пакета. Начальные параметры можно было выбрать таким образом, чтобы прошедшая часть пакета покинула барьер задолго до того, как появится основной пик, выбранный в качестве наблюдаемой величины. Этот пример демонстрирует нарушение принципа причинности, который положен в основу данного метода, и, следовательно, ограничивает область его применимости. Кроме того, трудно придумать экспериментальный способ измерения времени появления пакета по его пику или "центроиду".

Существует также класс подходов, определяющих время туннелирования с помощью ансамбля динамических траекторий. Эти динамические траектории возникают, как необходимый аппарат описания в фейнмановской и бомовской интерпретациях квантовой механики. В случае использования фейнмановских траекторий [42], время прохождения через барьер определялось, как функциональный интеграл по всем возможным траекториям, которые стартуют из заданной точки слева от барьера, а в некоторый момент времени приходят в точку, расположенную справа от барьера. В качестве интегрируемой функции в функциональном интеграле присутствовало произведение классического времени пребывания траектории внутри барьера на весовой множитель $\exp(iS(x(t^{'}))/\hbar)$, где $S(x(t^{'}))$ - действие, связанное с рассматриваемой траекторией $x(t^{'})$. Из-за умножения на комплексный вес вычисляемые времена имели действительную и мнимую часть и возникал вопрос о том, как соотносить эти времена с физически наблюдаемыми величинами, которые всегда являются действительными. Для объяснения комплексных времен, которые возникают и в других методах (например, в методе "физических часов" (см. ниже)), Соколовский и Коннор [43] рассмотрели так называемые "прямые" и "косвенные" измерения. При проведении "косвенного" измерения, которым и является рассматриваемый метод, величины могут оказаться комплексными.

Довольно широкое распространение получили подходы, использующие "физические часы". Физические часы это различные дополнительные степени свободы в системе, позволяющие определить продолжительность нахождения частицы в заданной области. В теоретических работах подробно исследовались три вида часов. В своей работе Базь и Рыбаченко [44, 45] в качестве часов использовали прецессию спина в слабом однородном магнитном поле, существующем внутри барьера. Сначала рассматривалась прецессия спина в одной плоскости, а затем Бюттикер [46] обобщил рассмотрение на трехмерный случай. За время туннелирования спин приобретает компоненту вдоль направления движения и вдоль магнитного поля. Понятно, что интенсивности регистрируемых компонент с поляризацией спина вдоль этих двух направлений будут пропорциональны времени пребывания частицы в области с магнитным полем, т.е в области барьера. Как оказалось, для прямоугольного барьера, определенные таким способом, времена туннелирования совпадают с действительной и мнимой частью комплексного времени туннелирования, введенного через фейнмановские интегралы по траекториям [42]. Обобщение описанного метода для произвольного потенциального барьера было сделано в работе [47]. Бюттикер и Ландауер [48] в качестве "физических часов" рассмотрели осциллирующий барьер, у которого амплитуда осцилляций временной компоненты была много меньше высоты барьера. На низких частотах частицы видят эффективный статический барьер, так как время пролета через барьер оказывается намного меньше периода колебаний временной компоненты барьера. При увеличении частоты, запаздывающие частицы или компоненты волнового пакета видят слегка модифицированный потенциальный барьер. Наконец, при некоторых частотах на туннелирующие частицы начинает оказывать влияние один или несколько периодов колебаний. Частота, на которой появится существенное отличие от адиабатического случая, соответствующего стационарному барьеру, будет определять обратное время взаимодействия с барьером или время его прохождения. Мартин и Ландауер [49] как "физические часы" выбирали осциллирующую амплитуду падающей волны. Для этого слева от барьера выбиралась волновая функция, представляющая собой суперпозицию двух плоских волн с разной энергией. Понятно, что в этом случае волновая функция справа от барьера будет тоже суперпозицией протуннелировавших частей плоских волн, которые однако имеют разную амплитуду прохождения через барьер, так как она зависит от энергии. Прошедшая волновая функция будет воспроизводить падающую, если амплитуды протуннелировавших плоских волн мало отличаются, что соответствует адиабатическому случаю. Разница энергий исходных плоских волн, при которой волновая функция за барьером не воспроизводит падающую, позволяет определить время прохождения потенциального барьера. Основное достоинство этого метода в том, что он применим ко всем видам потенциалов, однако он использует два значения энергии, и поэтому не понятно, какой энергии приписывать полученное время туннелирования.

Все ли часы дают один и тоже результат измерения? Конечно, нет. Однако, в ряде случаев эти результаты близки друг к другу или совпадают [47],[50]-[51]. Главное достоинство подходов с физическими часами заключается в том, что они пытаются определить время туннелирования через возможные измерения в физических экспериментах.

Не менее популярным подходом является поиск "операторов времени" и изучение их свойств [52]-[57]. Основная трудность, как было отмечено еще Паули [58], состоит в том, что не существует эрмитового оператора времени, измерение которого было бы возможно при том, что гамильтониан системы имеет ограниченный спектр. Были предприняты разные попытки построения операторов, которые описывали бы необходимые свойства физического времени. Для того, чтобы построенный оператор удовлетворял принципу соответствия, за основу для операторного построения выбирались соотношения из классической механики. Однако, как известно, построение операторного выражения, соответствующего классической величине, неоднозначно, а его связь с процессом измерения требует дополнительного анализа.

В настоящей работе время туннелирования определялось как разница средних времен "появления" и "присутствия" волнового пакета до и после барьера (см. раздел 2.1.1). Для расчета этих времен и исследования динамики туннелирующего волнового пакета использовался метод квантовой молекулярной динамики [26, 27].

2.1.1 Измеряемые величины

Изучение временных аспектов туннелирования можно начать с изучения эволюции волнового пакета. Вероятность обнаружить волновой пакет или частицу в произвольной точке x определяется квадратом модуля волновой функции $|\psi(x,t)|^2$. В нестационарной задаче эта вероятность зависит от времени и определяет характерные времена динамики волнового пакета. Если в эксперименте используется идеальный детектор (т.е. его измерение не возмущает волновой функции), реагирующий на присутствие частиц, тогда измеряемое им среднее “время присутствия” в точке x определяется формулой

$$\tilde{t}_x = \frac{\int_0^\infty dt\, t\, |\psi(x,t)|^2}{\int_0^\infty dt\, |\psi(x,t)|^2} \tag{2.1}$$

Описание этих времен можно найти в работах [59]-[61], а распределение “времен присутствия” в точке x имеет вид

$$\tilde{P}(t_x) = \frac{|\psi(x,t)|^2}{\int_0^\infty dt\, |\psi(x,t)|^2} \tag{2.2}$$

Чтобы найти квадрат волновой функции $|\psi(x,t)|^2$ достаточно вычислить квантовомеханическое среднее от оператора

$$\langle \psi(t) | \delta\{\hat{q}-x\} | \psi(t) \rangle = \int dq\, \delta\{q-x\}\, |\psi(q,t)|^2 = |\psi(x,t)|^2$$

На языке вигнеровского формализма это равносильно вычислению интеграла

$$\langle \psi(t) | \delta\{\hat{q}-x\} | \psi(t) \rangle = \iint dq dp\, \delta\{q-x\}\, W(q,p,t) = \int dp\, W(x,p,t) \tag{2.3}$$

Если точка x выбрана справа от барьера, то этот интеграл позволяет вычислить квадрат протуннелировавшей волновой функции. Распределение времен “присутствия” в соответствии с формулой (2.3) можно переписать в виде

$$P_x(t) = \frac{|\psi(x,t)|^2}{\int_0^\infty dt\, |\psi(x,t)|^2} = \frac{\int dp\, W(x,p,t)}{\int_0^\infty dt \int dp\, W(x,p,t)} \tag{2.4}$$

Чтобы определить средний момент времени, когда волновой пакет проходит через детектор в точке x, необходимо вычислить интеграл

$$\langle t\,(x)\rangle \;=\; \int_0^\infty dt\, t\, P_x\,(t)\,, \tag{2.5}$$

а среднее время перемещения пакета из точки x_i в точку x_f будет равно

$$\langle t_T\,(x_i, x_f)\rangle = \langle t\,(x_f)\rangle - \langle t\,(x_i)\rangle \tag{2.6}$$

Если точки x_i и x_f выбраны по разные стороны потенциального барьера, тогда выражение (2.6) можно использовать в качестве оценки времени туннелирования.

Главный недостаток определения (2.4) заключается в том, что в физических экспериментах, как правило, используются детекторы реагирующие на плотность потока, а не на плотность вероятности, поэтому для сопоставления теории и эксперимента необходимо рассматривать другую величину. Для этого вводится определение распределения времен “появления” волнового пакета в заданной точке через плотность потока вероятности [62]

$$P_x\,(t) = \frac{\langle\psi\,(t)\,|\hat{J}\,(x)\,|\psi\,(t)\rangle}{\displaystyle\int_0^\infty dt\,\langle\psi\,(t)\,|\hat{J}\,(x)\,|\psi\,(t)\rangle}, \tag{2.7}$$

где оператор потока

$$\hat{J}\,(x) = \frac{1}{2}\,(\hat{p}\,\delta\{\hat{q}-x\} + \delta\{\hat{q}-x\}\,\hat{p}) \tag{2.8}$$

Конечно, определение (2.7) не является настоящей функцией распределения из теории вероятности, так как в некоторых точках эта функция может принимать отрицательные значения. Тем не менее, определение (2.7) будет функцией распределения, если через точку x отсутствует обратный поток или он пренебрежимо мал. Для этого точка x выбирается на достаточном расстоянии от барьера. Измерив распределения времен появления пакета перед и за барьером, можно будет вычислить время время прохождения через область намного большую, чем область потенциального барьера. Это время аналогично асимптотическим фазовым временам [63] и кроме времени туннелирования, времени взаимодействия пакета с барьером, содержит также время прохождения через область пространства, где потенциальный барьер равен нулю. Разделить эти времена не представляется возможным. Эта проблема времени туннелирования, несмотря на продолжающиеся обсуждения [52]-[57],[64]-[65], еще не получила своего окончательного решения.

Другая проблема касается физической реализации эксперимента, в котором одновременное детектирование пакета перед и за барьером не приводило бы к значительной редукции волновой функции. По этой причине в экспериментах обычно измеряется другая величина - “временная задержка” [66]-[70]. Временная задержка возникает из-за наличия барьера и определяется как разница средних времен появления туннелирующего и “свободного” пакета

$$\Delta\tau_{arrival}(x) = \langle t_x\rangle^{tunn} - \langle t_x\rangle^{free} \tag{2.9}$$

Использование определения (2.7) для вычисления средних времен “появления” дает разумную оценку временных задержек, измеряемых экспериментально.

В вигнеровской формулировке квантовой механики распределение времен появления (2.7) переписывается в следующем виде

$$P_x\left(t\right) = \frac{\displaystyle\iint dqdp\, J_x\left(q,p\right)\, W\left(q,p,t\right)}{\displaystyle\int_0^\infty dt \iint dqdp\, J_x\left(q,p\right)\, W\left(q,p,t\right)}, \tag{2.10}$$

где символ Вейля от оператора тока $\hat{J}\left(x\right)$ после вычисления имеет вид

$$J_x\left(q,p\right) = \frac{\hbar}{2}\sin\left(\frac{2p\left(x-q\right)}{\hbar}\right)\frac{\partial}{\partial q}\delta\{q-x\} \tag{2.11}$$

Подставив в (2.7) выражение (2.11) и взяв по частям интеграл по переменной q, можно получить следующее выражение

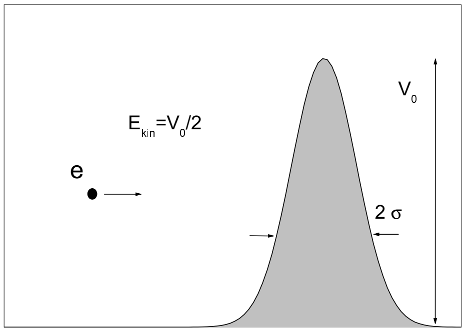
$$P_x\left(t\right) = \frac{\displaystyle\int dp\, p W\left(x,p,t\right)}{\displaystyle\int_0^\infty dt \int dp\, p W\left(x,p,t\right)} \tag{2.12}$$

Сравнивая выражения (2.4) и (2.12), нетрудно увидеть, что разница между ними заключается в появлении в числителе и знаменателе выражения (2.12) импульса p, который показывает, что в последнем выражении измеряется плотность потока вероятности.

2.1.2 Физическая модель

Рассмотрим серию экспериментов о туннелировании электрона с волновой функцией в начальный момент времени

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x)^{1/4}} \exp\left[-\left(\frac{x-x_0}{2\sigma_x}\right)^2 + ik_0x\right] \qquad (2.13)$$



Туннелирование исследовалось через потенциальный барьер вида $V(x) = V_0 \exp^{-(x-x_B)^2/\sigma^2}$. Функция распределения Вигнера $W(p,q,t)$ (1.9) соотвествующая волновой функции (2.13) записывается в виде

$$W(p,q,0) = e^{-\frac{(q-x_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{2\sigma^2(p-\hbar k_0)^2}{\hbar^2}} \qquad (2.14)$$

Центр волнового пакета $x_0 = \langle \psi(x,0) | \hat{x} | \psi(x,0) \rangle$ выбирался достаточно далеко от левой границы барьера, чтобы начальная плотность вероятности за барьером была пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью прохождения через барьер $|T|^2$. Туннелирование происходило через "широкий" ($\sigma = 2.5$ nm - характерный масштаб барьеров в $Al_xGa_{1-x}As$ структурах) и "узкий" ($\sigma = 0.5$ nm) гауссовы барьеры с высотой ($V_0 = 0.3$ eV) и центром в $x_B = 0$. Электрон имел начальную кинетическую энергию ($E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m = V_0/2 = 0.15$ eV). Использовалась система единиц ($\hbar = m = V_0 = 1$), а расстояния измерялись в единицах приведенной волны де Бройля ($\lambda = 1/k_0$). В этих единицах начальные параметры волнового пакета и барьера можно записать как

$$\begin{aligned} E_0 &= 0.5, \quad \triangle k_0 = 0.04(0.125), \\ \sigma_x &= 1/2\triangle k_0 = 12.5(4), \quad x_0 = -92.5(-43), \\ \sigma &= 5(2.5\text{nm}), \quad \sigma = 1(0.5\text{nm}), \end{aligned} \qquad (2.15)$$

здесь $\triangle k_0$ - начальная неопределенность импульса в волновом пакете, удовлетворяющая принципу неопределенности $\sigma_x \cdot \triangle k_0 = \hbar/2$.

2.1.3 Временная эволюция волнового пакета

Взаимодействие волнового пакета ($\hbar\Delta k_0 = 0.125$) с "узким" потенциальным барьером [$\sigma = 1$ (0.5 nm)] показано на Рис. 2.1 (a),(b). На них представлена плотность вероятности отраженного $|\psi_R(x,t)|^2$ (a) и протуннелировавшего $|\psi_T(x,t)|^2$ (b) волновых пакетов в последовательные моменты времени $t = 114 - 239$ fs. Вычисление плотности вероятности проводилось по формуле (2.3), т.е. с помощью вигнеровской функции распределения. Этот интеграл вычислялся вдоль квантовых и классических траекторий. При расчете по классическим траекториям, только высокоэнергетические компоненты пакета могли классически пройти поверх барьера. Этот расчет соответствует зависимости 1 на Рис. 2.1 (c), при этом эволюция функции Вигнера описывается лишь первым членом итерационного ряда (1.19). В рамках формализма квантовых траекторий, прохождение компонент пакета за барьер связано со случайными возмущениями импульса, т.е. виртуальным изменением энергии. Результаты этого расчета соответствуют зависимости 2 на Рис. 2.1 (c). Теперь в эволюции вигнеровской функции учитываются квантовые поправки, вносимые всеми членами ряда (1.19). Разумеется, при расчете по квантовым траекториям учитываются и высокоэнергетические компоненты, которые проходят над барьером, так как они описывают вклад первого члена ряда (1.19). Однако, как показывает сравнение зависимостей 1 и 2 на Рис. 2.1 (c), для "узкого" барьера их роль незначительна и основная часть пакета проходит над барьером за счет виртуального изменения энергии, описываемого как случайные возмущения импульса квантовых траекторий. Изучение туннелирования через "широкий" барьер приводит к противоположному выводу. На Рис. 2.1 (d) зависимости 1 и 2 почти совпадают, это означает, что основная часть пакета прошла над барьером классическим образом, а вклад всех членов ряда (1.19) кроме первого пренебрежимо мал. Чтобы избежать подобной ситуации и восстановить важность квантовых эффектов, необходимо уменьшить неопределенность импульса начального волнового пакета. Далее все вычисления для "широкого" барьера приводятся при неопределенности импульса $\hbar\Delta k_0 = 0.04$.

2.1.4 Средняя координата, средний импульс, дисперсии

На Рис. 2.2 (a) представлена эволюция средней координаты $\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle$ волнового пакета для расчета по классическим (зависимость 1) и квантовым траекториям (зависимость 2). До взаимодействия с барьером в этих двух методах расчета $\langle x\rangle$ не наблюдается никаких различий (зависимости 1 и 2 совпадают). Объяснить этот результат можно следующим образом. Квантово-механические свойства проявляются в обсуждаемом методе, как в свойствах начального состояния волнового пакета, так и в его эволюции. Так как начальные данные для квантовых и классических определяются функцией распре-

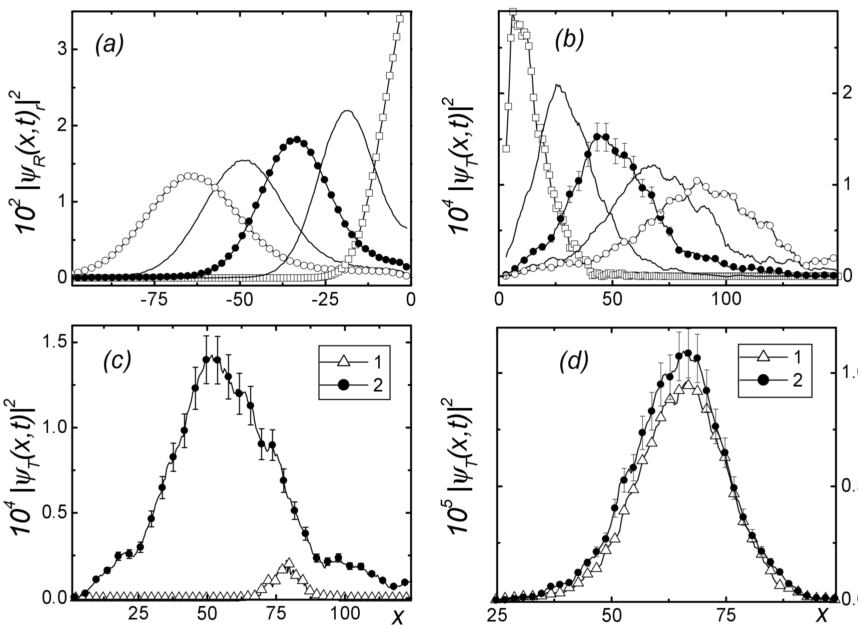


Рис. 2.1: Плотность вероятности отраженного $|\psi_R(x,t)|^2$ (a) и прошедшего $|\psi_T(x,t)|^2$ (b) волнового пакета в моменты времени $t_i = 144 - 239$ fs при дисперсии импульса $\Delta k = 0.125$ и “толщине” барьера $\sigma = 1$ (0.5 nm); (c, d) - $|\psi_T(x,t)|^2$ в момент времени $t = 187$ fs, $\Delta k = 0.125$, “толщина” барьера $\sigma = 1$ (0.5 nm) (c), $\sigma = 5$ (2.5 nm) (d); 1 - расчет по классическим траекториям, 2 - по квантовым траекториям.

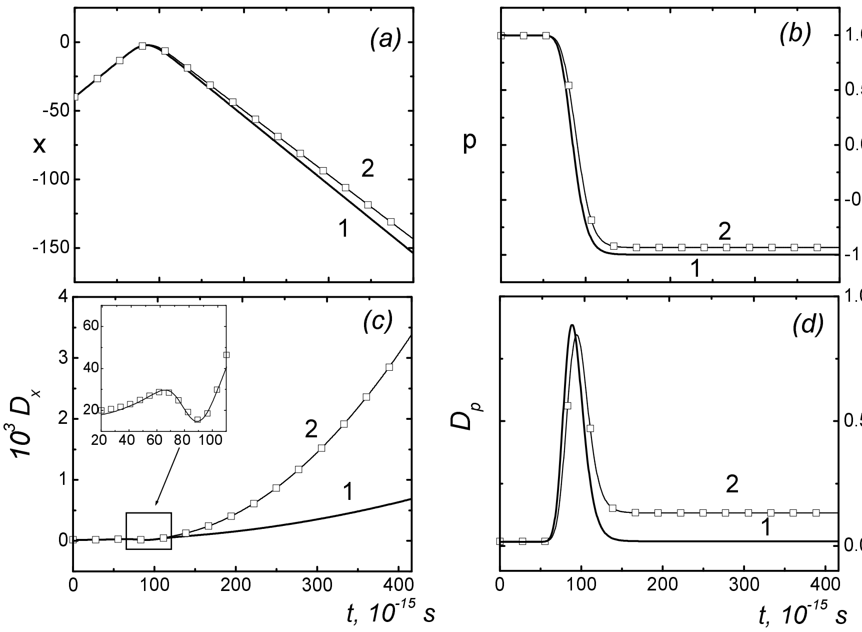


Рис. 2.2: (a) Средняя координата x, (b) средний импульс p, (c) дисперсия координаты D_x, (d) дисперсия импульса D_p, 1 - расчет по классическим траекториям, 2 - квантовым траекториям.

деления начального момента времени, то совпадение $\langle x \rangle$ на Рис. 2.2 (a) должно объясняться эволюцией волнового пакета: пока волновой пакет движется к барьеру и взаимодействие с барьером пренебрежимо мало, его эволюцию можно описывать классическими траекториями без возмущений импульса. В этом случае в выражении для функции распределения достаточно учесть только первый член ряда (1.19). Этот результат можно получить и аналитически, проведя оценку правой части уравнения Вигнера-Лиувилля (1.4). Для начальной функции Вигнера (2.14) и гауссового барьера можно показать, что величина интеграла в правой части уравнения (1.4) экспоненциально затухает с увеличением расстояния до барьера, а в этом случае уравнение (1.4) переходит в хорошо известное классическое уравнение Лиувилля, а его характеристики - обычные классические траектории.

Отличие в поведении кривых 1 и 2 появляется после взаимодействия пакета с барьером. Теперь классические траектории больше не являются характеристиками и неправильно описывают эволюцию. На Рис. 2.2 (a) и (b) средняя координата и импульс, соотвествующие расчету по квантовым траекториям (зависимость 2), отличаются от "классического" расчета (зависимость 1). Это связано со следующими обстоятельствами. Во-первых, так как основная часть пакета отражается от барьера, то, как видно из Рис. 2.2 (b), после рассеяния средний импульс меняет свой знак. Во-вторых, классические траектории (зависимость 1) не учитывают туннелирование, а учитывают только незначительное надбарьерное прохождение, возникающее за счет неопределенности импульса рассматриваемого волнового пакета. Между тем, часть пакета прошедшая за барьер имеет положительный импульс и движется в противоположную сторону относительно отраженной части. По этой причине, ее вклад в средние $\langle x \rangle$ и $\langle p \rangle$ имеет другой знак. Этот вклад пакета прошедшего за барьер объясняет расхождение расчета 1 и 2.

Движение прошедшего и отраженного пакетов в разные стороны объясняет также более быстрый рост дисперсии координаты квантового расчета (зависимость 2, Рис. 2.2 (c)) по сравнению с "классическим" (зависимость 1), который учитывает только расплывание волнового пакета во времени. Во вставке на Рис. 2.2 (c) более детально показано поведение ширины пакета при рассеянии на барьере.

Взаимодействие пакета с барьером приводит также к интересному поведению дисперсии импульса (Рис. 2.2 (d)). Постоянные значения (зависимость 1) на начальном и конечном участках показывают дисперсию импульса в падающем и отраженном волновых пакетах, т.е. до и после взаимодействия с барьером. Наблюдаемый пик связан с изменением знака импульса пакета при рассеянии, а также с тем, что разные компоненты пакета (имеются в виду Фурье компоненты в импульсном пространстве) достигают и отражаются от барьера в разное время. Увеличение дисперсии импульса (зависимость 2) на конечном участке объясняется появлением при квантовом расчете туннелирующего пакета, импульс которого положителен.

2.1.5 Распределение времен "присутствия" и "появления". Функция распределения по импульсам

На Рис. 2.3 (a), (b) приводятся результаты расчета ненормированного распределения времен присутствия (нормированное распределение определяется выражением (2.4)) в разных точках x_i, $i = 1, \ldots, 5$ до, внутри и за барьером (зависимости 1-5). На Рис. 2.4 (a), (b) представлены аналогичные результаты для ненормированного распределения времен появления (2.7). Зависимость 1 на Рис. 2.3 (a) и Рис. 2.4 (a) показывает поведение плотности и потока вероятности, соответствующие тому, что через детектор в разные моменты времени проходят падающий и отраженный волновые пакеты. Зависимость 2 на Рис. 2.4 (a) - это поведение потока, измеренного в некоторой точке слева от центра барьера. Через эту точку проходят туннелирующие и высокоэнергетические компоненты, присутствующие в исходном пакете. Для потока плотности вероятности на Рис. 2.4 (b) (зависимости 3-5) наблюдается интересный результат. Поток, измеренный в центре барьера (зависимость 3) оказывается значительно меньше, чем поток на правой границе барьера (зависимость 4) и намного правее (зависимость 5). Это означает, что внутри барьера происходит интерференция туннелирующих компонент волнового пакета, движущихся в разных направлениях. Одни из компонент полностью проходят через барьер, а другие отражаются внутри барьера и не достигают его правой границы. Интерференция отраженных и прошедших компонент приводит к наблюдаемому уменьшению амплитуды потока в центре барьера (зависимость 3) и на правой границе (зависимости 4 и 5). Интересно отметить, что исследование туннелирования с помощью классических траекторий в комплексном времени также обнаруживает подобный эффект [65]. Оказывается, что прохождение через барьер происходит как серия попыток, многие из которых оканчиваются неудачно из-за отражений в различных точках под барьером.

Сравнение распределений времен "присутствия" и "появления" на Рис. 2.3 (b) и 2.4 (b) показывает их почти полное совпадение, совпадают также средние

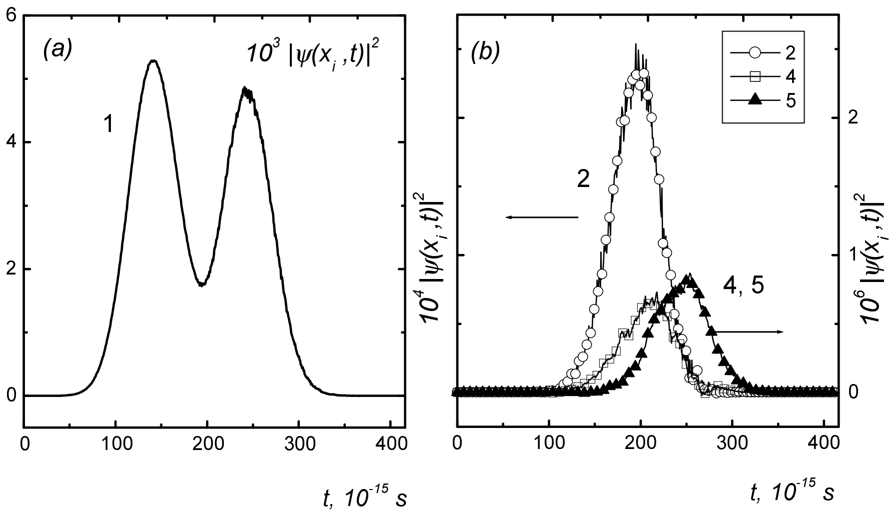


Рис. 2.3: Плотность вероятности или ненормированные распределения времен присутствия (2.4): (a) $|\psi(x_i,t)|^2$ в $x_1 = -5\sigma$ (зависимость 1); (b) $|\psi(x_i,t)|^2$ в $x_2 = -0.67\sigma$ (2), в $x_4 = 0.67\sigma$ (4), в $x_5 = 5\sigma$ (5); центр барьера расположен в $x_3 = 0$, "толщина" барьера $\sigma = 5$ (2.5 nm).

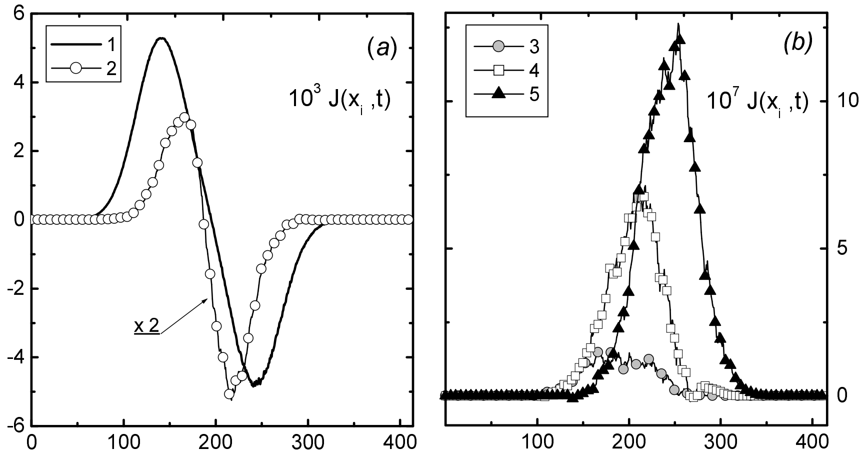


Рис. 2.4: Плотность потока вероятности $J(x_i,t)$ или ненормированные распределения времен появления (2.7), вычисленные в нескольких точках i: (a) $x_1 = -5\sigma$ (1) и $x_2 = -0.67\sigma$ (2); (b) $x_3 = 0$ (3), $x_4 = 0.67\sigma$ (4) и $x_5 = 5\sigma$ (5); "толщина" барьера $\sigma = 5$ (2.5 nm).

времена “присутствия” (2.1) и “появления” (2.5) (их разница < 1 fs). Как уже было сказано, распределение времен появления (2.7) не является настоящей функцией распределения и, как видно из Рис. 2.4 (a) (зависимость 2), не применимо для вычисления среднего времени появления пакета перед барьером. Данное обстоятельство не позволяет вычислить время туннелирования как разницу средних времен появления пакета перед и за барьером (2.6). Тем не менее, для оценки времени туннелирования можно воспользоваться формулой (2.6), т.е. вместо среднего времени появления перед барьером использовать среднее время присутствия (2.1). В этом случае время туннелирования через потенциальный барьер имеет значение $\tau_T(-0.67\sigma, +0.67\sigma) = 12$ fs, т.е. почти совпадает со временем движения через аналогичную область без барьера $\tau_T^{class}(-0.67\sigma, +0.67\sigma) = 13.4$ fs.

“Временные задержки” измерялись в точках $x_4 = 0.67\sigma$ (1.6 nm) и $x_5 = 5\sigma$ (12 nm), их значение оказалось равным $\Delta\tau_{arrival}(x_4) = 8$ fs и $\Delta\tau_{arrival}(x_5) \leq 0.5$ fs. Если эти измерения проводить еще дальше от левой и правой границы барьера, то значение $\Delta\tau_{arrival}(x)$ становится отрицательным. Таким образом, прослеживается следующая закономерность: несмотря на то, что туннелирующий волновой пакет сначала останавливается на левой границе барьера ($\Delta\tau_{arrival}(x_4) = 8$ fs), а затем проходит через барьер приблизительно за то-же самое время, которое было бы затрачено “свободным” пакетом (т.е. пакетом, который бы двигался через аналогичную область без барьера), справа от барьера прошедший пакет появляется раньше свободного пакета. Это интересное наблюдение может иметь следующее объяснение: *вероятность прохождения через гауссовый потенциальный барьер растет с увеличением энергии, поэтому Фурье компоненты пакета с большим импульсом имеют большую вероятность оказаться за барьером. Эти высокоэнергетические компоненты движутся быстрее свободного пакета, и поэтому “временные задержки” за барьером могут принимать отрицательные значения.*

Данное заключение подтверждается также функцией распределения по импульсам

$$\frac{\langle \psi(t) | \delta(\hat{p} - p) | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle}, \tag{2.16}$$

которая вычислялась для “узкого” (Рис. 2.5 (a)) и “широкого” (Рис. 2.5 (b)) барьеров в моменты времени $t = 218$ и 385 fs. На этих характерных временах функция распределения перестает меняться, так как взаимодействие с барьером уже закончилось. Из Рис. 2.5 (a), (b) видно, что средний импульс протуннелировавшего волнового пакета (зависимость 2) оказывается значитель-

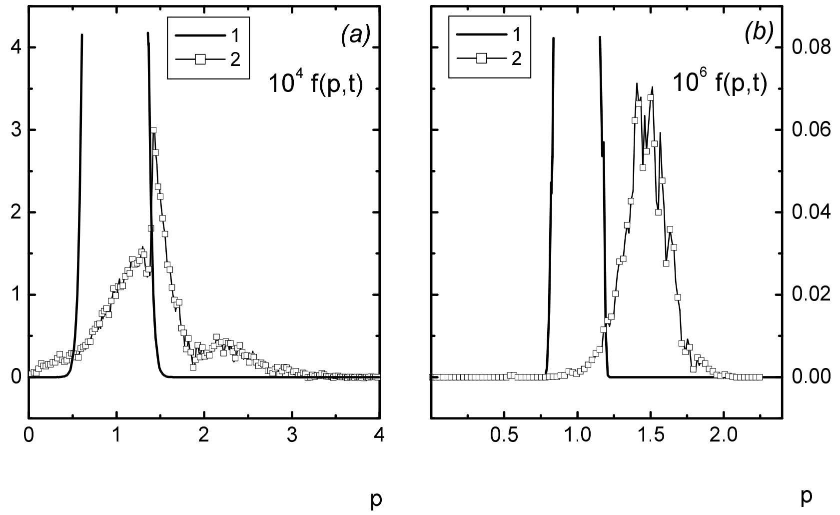


Рис. 2.5: Распределение импульсов в исходном волновом пакете ($t = 0$, зависимость 1) и в пакете прошедшем за барьер (зависимость 2): (a) $\Delta k = 0.125$, "толщина" барьера $\sigma = 1$ (0.5 nm), $t = 218$ fs; (b) $\Delta k = 0.04$, "толщина" барьера $\sigma = 5$ (2.5 nm), $t = 385$ fs.

но больше среднего импульса в начальный момент времени (зависимость 1). Наблюдаемый пик функции распределения (зависимость 2 на Рис. 2.5 (a)) связан именно с теми высокоэнергетическими Фурье компонентами пакета, которые прошли поверх барьера. Видно также, что туннелирование через "узкий" потенциальный барьер приводит к большей дисперсии функции распределения, а туннелирование через "широкий" барьер значительно смещает центр распределения в сторону больших импульсов (зависимость 2 на Рис. 2.5 (b)).

2.1.6 Основные результаты

В вигнеровской формулировке квантовой механики для решения интегрального уравнения Вигнера-Лиувилля использовался метод квантового обобщения классической молекулярной динамики. Обсуждаемый метод его решения не требует большого увеличения вычислительных затрат и позволяет избежать вычислительных трудностей, с которыми приходится сталкиваться при решении нестационарного уравнения Шредингера.

В рамках этого подхода решалась нестационарная задача о туннелировании конечного волнового пакета, т.е задача, где важен учет экспоненциально малых квантовых эффектов. Была проанализирована эволюция волнового пакета, поведение средних и дисперсии координаты и импульса, а также распределения времен “присутствия” и “появления” волнового пакета при разных положениях идеального измерительного детектора. Были получены следующие результаты: 1) время туннелирования через потенциальный барьер имеет приблизительно тот же порядок, что и время прохождения аналогичного расстояния свободным волновым пакетом; 2) туннелирующий волновой пакет задерживается потенциальным барьером ($\Delta\tau_{arrival}(x) > 0$), а “временная задержка” измеренная непосредственно за барьером имеет положительное значение; 3) эспериментальное измерение *отрицательных* “временных задержек” возможно лишь начиная с некоторого расстояния справа от барьера и связано со сдвигом функции распределения импульсов в высокоэнергетическую область; 4) через гауссовый барьер проходят преимущественно высокоэнергетические Фурье компоненты волнового пакета, которые ответственны за смещение центра функции распределения импульсов. В результате средний импульс прошедшего пакета оказывается больше среднего импульса волнового пакета до туннелирования; 5) туннелирование через “узкий” потенциальный барьер приводит к большей дисперсии импульсов протуннелировавших компонент, а через “широкий” к заметному увеличению значения среднего импульса; 6) результаты расчета плотности потока вероятности показали, что туннелирующий волновой пакет не полностью проходит через барьер, часть испытывает отражение и не достигает противоположной границы барьера.

2.2 Локализация электронов в неупорядоченных системах рассеивателей

Структура и свойства неупорядоченных конденсированных систем в последние десятилетия привлекают к себе пристальное внимание как физиков, так и представителей смежных наук. Причиной этого является, с одной стороны, успехи физики твердого тела и ее многочисленные приложения, а с другой стороны то, что именно неупорядоченные системы являются системами с наиболее общей структурой, в то время как строго упорядоченные кристаллические структуры с совершенной решеткой частиц представляют собой, строго говоря, идеализированные объекты. Значительный прогресс в построенной к настоящему времени аналитической теории неупорядоченных конденсированных систем обусловлен несколькими обстоятельствами. Во-первых, это объясняется применением новых теоретических подходов, а также неуклонным ростом производительности вычислительной техники. Во-вторых, новые экспериментальные технологии, базирующиеся на современной микроэлектронике, позволяют проверять предсказания построенной теории, и таким образом способствуют подтверждению или опровержению макроскопических моделей, которые лежат в ее основе.

Интерес к распространению и локализации всевозможных типов волн, квантовых возбуждений и коротких нерегулярных импульсов в средах не обладающих пространственной периодичностью в последнее время резко возрос [71, 72]. Исследуются локализация звуковых волн в непрерывных средах и гелиевых пленках на случайно-неоднородной подложке, электромагнитных волн в твердых телах и плазме, локализация поверхностных волн в металлах.

Более сорока лет назад вышла основополагающая работа Ф.Андерсона [73], в которой были приведены аргументы в пользу того, что если в модели сильной связи с шириной зоны B ввести флуктуации $\pm V_0/2$, то при превышении параметром V_0/B некоторого критического значения все электроны будут локализованы. Позднее в работах Мотта [74] было показано, что электроны вблизи краев зоны будут локализованы, даже если все электроны в зоне и не являются локализованными. Мотт ввел понятие о крае подвижности, по которой проходит граница между локализованными электронами с волновыми функциями, спадающими по экспоненциальному закону, и электронами в делокализованных состояниях с малыми длинами свободного пробега. Мотт предположил, что при пересечении уровнем Ферми края подвижности проводимость при $T = 0$ скачком падает до нуля и происходит так называемый переход металл-полупроводник. В последующие десятилетия концепция локализации стала основной в физике неупорядоченных конденсированных систем, породив такие понятия как андерсоновский диэлектрик, переход Андерсона, слабая локализация и т.д. [71]-[76].

Стоит также отметить, что в ряде работ по локализации существенным образом используется идеальность кристаллической решетки и поэтому они не могут быть перенесены на неупорядоченные конденсированные системы без существенных модификаций. Эти модификации, как правило, используют различные виды теории возмущений, требующие для применимости существование различных физических параметров малости. В реальных же условиях малость этих параметров вызывает сомнение, что сразу распространяется и на полученные в рамках теории возмущений физические результаты. Поэтому в данном разделе поставлена цель применить численный подход к исследованию транспортных свойств квантовых конденсированных неупорядоченных систем, не требующий предварительных разложений по малым физическим параметрам.

Для этой цели используется изложенный в главе 1.1 метод квантовой молекулярной динамики, который позволяет исследовать динамику квантовых частиц, проводить расчеты квантово-механических средних и квантовых временных корреляционных функций, описывающих электронные транспортные свойства конденсированных сред.

Основные результаты настоящей главы опубликованы в работах [26, 28].

2.2.1 Электропроводность и диэлектрическая проницаемость

В соответствии с квантовыми формулами Кубо в одночастичном приближении тензор электропроводности может быть записан в виде [77]:

$$\sigma_{\alpha\gamma}(\omega) = n \int_0^\infty \exp(i\omega t - \epsilon t) \int_0^\beta \left\langle \hat{J}_\gamma \hat{J}_\alpha (t + i\hbar\lambda) \right\rangle d\lambda dt \qquad (2.17)$$

где $\epsilon \to 0$, n - плотность электронов, $\beta = 1/k_B T$, $\hat{J}_\alpha = e\dot{x}_\alpha(t) = ep_\alpha/m$ - оператор электрического тока, $\dot{x}_\alpha$ - оператор α - компоненты скорости электрона.

В вигнеровском представлении тензор электропроводности имеет вид :

$$\sigma_{\alpha\gamma}(\omega) = n \int_0^\infty \exp(i\omega t - \epsilon t) \int_0^\beta \phi_{\alpha\gamma}(t, \lambda) d\lambda dt \qquad (2.18)$$

$$\phi_{\alpha\gamma}(t,\lambda) = \left\langle \hat{J}_\gamma \hat{J}_\alpha (t + i\hbar\lambda) \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{2\nu}} \int dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 J_\gamma(p_1,q_1) J_\alpha(p_2,q_2) W(p_1,q_1;p_2,q_2,t;i\hbar\beta;i\hbar\lambda)$$

где $J_\gamma(p_1,q_1)\,, J_\alpha(p_2,q_2)$ - символы Вейля операторов $\hat{J}_\gamma$ и $\hat{J}_\alpha$, которые выражаются через матричные элементы $\left\langle q' \left| \hat{J} \right| q'' \right\rangle$ с помощью соотношений [25]

$$J(p,q) = \int d\xi \exp\left(-i\frac{p\xi}{\hbar}\right) \left\langle q - \frac{\xi}{2} \left| \hat{J} \right| q + \frac{\xi}{2} \right\rangle \tag{2.19}$$

где $q - \frac{\xi}{2} = q'$, $q + \frac{\xi}{2} = q''$ и υ - размерность пространства. Функция распределения $W(p_1,q_1;p_2,q_2,t;i\hbar\beta;i\hbar\lambda)$ определена выражением

$$W(p_1,q_1;p_2,q_2,t;i\hbar\beta;i\hbar\lambda) = \int d\xi_1 d\xi_2 \exp\left(i\frac{p_1\xi_1}{\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_2\xi_2}{\hbar}\right) \times$$

$$\left\langle q_1 + \frac{\xi_1}{2} \left| \exp\left(i\frac{\tau_1 H}{\hbar}\right) \right| q_2 - \frac{\xi_2}{2} \right\rangle \left\langle q_2 + \frac{\xi_2}{\hbar} \left| \exp\left(-i\frac{\tau_2 H}{\hbar}\right) \right| q_1 - \frac{\xi_1}{\hbar} \right\rangle \tag{2.20}$$

Здесь $\tau_1 = t_1 + i\hbar\lambda$, $\tau_2 = t_2 - i\hbar(\beta - \lambda)$. Таким образом, проблема численного расчета тензора электропроводности может быть сведена к рассмотрению эволюции функции $W(p_1,q_1;p_2,q_2,t;i\hbar\beta;i\hbar\lambda)$, которая является решением интегрального уравнения Вигнера-Лиувилля (1.45).

Обезразмерим исходные уравнения. Безразмерный тензор электропроводности определяется выражением:

$$\sigma_{\alpha\gamma}(\omega) = n \int_0^\infty \exp(i\omega t - \epsilon t) \int_0^\beta \left\langle \hat{J}_\gamma \hat{J}_\alpha (t + i\hbar\lambda) \right\rangle d\lambda dt \equiv$$
$$\equiv nk^{-2} e^2 \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}(\omega) / 2E_0 t' \tag{2.21}$$

где t' - максимальная величина времени рассмотрения динамических процессов квантовой системы, принята в качестве единицы измерения времени t. В качестве единицы длины используется обратная величина волнового числа k^{-1}, которое определяется выражением: $k^2 = 2mE_0/\hbar^2$, где m - масса квантовой частицы, а E_0 - характерная энергия системы. Для физического анализа частоту ω в выражении для тензора электропроводности удобно измерять в безразмерных единицах $V_0/\hbar$, поэтому в дальнейшем при обсуждении результатов расчета будем использовать безразмерную частоту $\omega\hbar/V_0$ и безразмерное время $tV_0/\hbar$.

2.2.2 Физическая модель

В одноэлектронном приближении для системы классических хаотических рассеивателей Гамильтониан может быть записан в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_{es} + \tilde{H}_{ss}^{cl} \tag{2.22}$$

$$\hat{H}_{es} = -\triangle/2M + \sum_{j=1}^{N} \xi_0^{es} U_{es}\left(|r - R_j|/\sigma'\right)$$

$$\tilde{H}_{ss}^{cl} = \sum_{j=1}^{N} p^2 m/2Mm_s + \sum_{i\neq j}^{N} \xi_0^{ss} U_{ss}\left(|R_i - R_j|/\sigma''\right)$$

где m_s - масса рассеивателя $(m/m_s \ll 1)$, $\tilde{H}_{ss}^{cl}$ - классическая функция Гамильтона рассеивателей, $\xi_0^{es} = V_0^{es}t'/\hbar$ и $\xi_0^{ss} = V_0^{ss}t'/\hbar$ - константы парного потенциала взаимодействия электрона с рассеивателями $U_{es}\left(|r - R_j|/\sigma'\right)$ и рассеивателей между собой $U_{ss}\left(|R_i - R_j|/\sigma''\right)$ соответственно, R_j - координаты рассеивателей $(j = 1, ..N)$, σ характерная длина потенциала, $M = \hbar/2E_0t'$.

Потенциал взаимодействия электронов с рассеивателями и рассеивателей между собой выбран в виде гауссовой экспоненты

$$U\left(|r - r'|/\sigma\right) = \exp\left(-|r - r'|^2/\sigma^2\right) \tag{2.23}$$

с равными константами взаимодействия и характерными длинами ($V_0^{es} = V_0^{ss} > 0$ и $\sigma' = \sigma''$).

Усреднение в каноническом ансамбле по всем конфигурациям взаимодействующих между собой рассеивателей и рассеивателей с электроном в соответствии с формулами Кубо и изложенным подходом включено в спектральную плотность $\bar{W}(p_1,q_1; p_2,q_2; i\hbar\beta)$.

Для расчета тензора электропроводности (2.18) использовался метод квантовой молекулярной динамики, изложенный в разделе 1.1. Данный метод применялся для исследования одномерной локализации электронов. Все вычисления проведены для плотных систем с безразмерной плотностью рассеивателей порядка единицы $\left(n\sigma \approx 1, k\sigma \approx 1, k^{-1}n \approx 1\right)$.

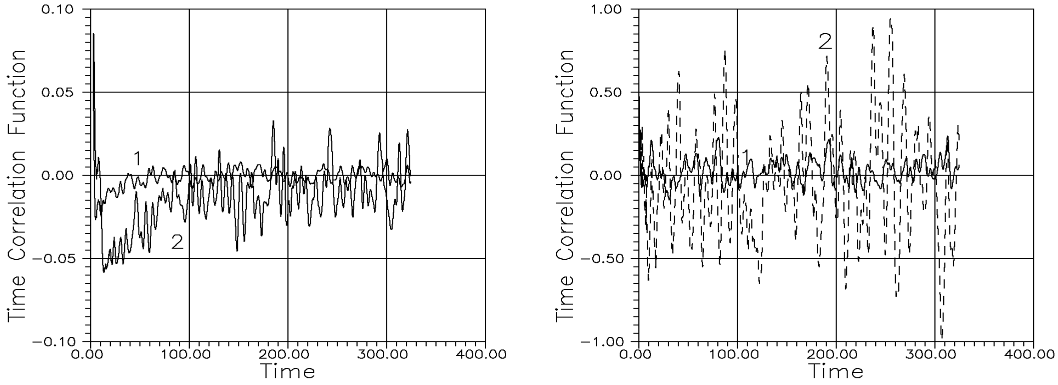


Рис. 2.6: Автокорреляционные функции импульс-импульс в зависимости от $tV_0/\hbar$ для температуры $kT/V_0 = 0.04$ (a) и 0.0025 (b); 1 - приближение классических траекторий, 2 - квантовые траектории.

2.2.3 Временные корреляционные функции

Для двух отношений температуры системы к высоте потенциального барьера (kT/V_0) равных 0.04 и 0.0025 на Рис. 2.6 (a) и (b) представлены результаты расчетов диагональных элементов тензора электропроводности, являющихся временными корреляционными функциями импульс- импульс. Зависимости 1 на обеих рисунках соответствуют расчетам, в которых учитывается только первый член итерационного ряда (1.19), зависимости 2 представляют результаты, полученные суммированием всех членов итерационного ряда. Таким образом, зависимости 1 соответствуют расчетам с помощью классических траекторий, не имеющих скачков импульса (см. раздел 1.1). При более высокой температуре корреляционная функция 1 довольно быстро затухает.

Зависимости 2 на обеих рисунках представляют результаты, полученные для траекторий со скачками импульсов. Различие между зависимостями 1 и 2 увеличивается с понижением температуры. Из анализа Рис. 2.6 (b) следует, что при более низкой температуре зависимости 1 и 2 осциллируют не затухая. Этот недостаток исследуемой модели связан с тем, что мы рассматриваем классические тяжелые рассеиватели как неподвижные частицы, что несправедливо при очень низких температурах, когда характерные динамических времена электронов и тяжелых частиц сближаются.

Действительные и мнимые части образов Фурье корреляционных функций в зависимости от безразмерной частоты $\hbar\omega/V_0$ представлены на Рис. 2.7 (a),(b) и 2.8 (a),(b). Действительные части образов Фурье имеют физический

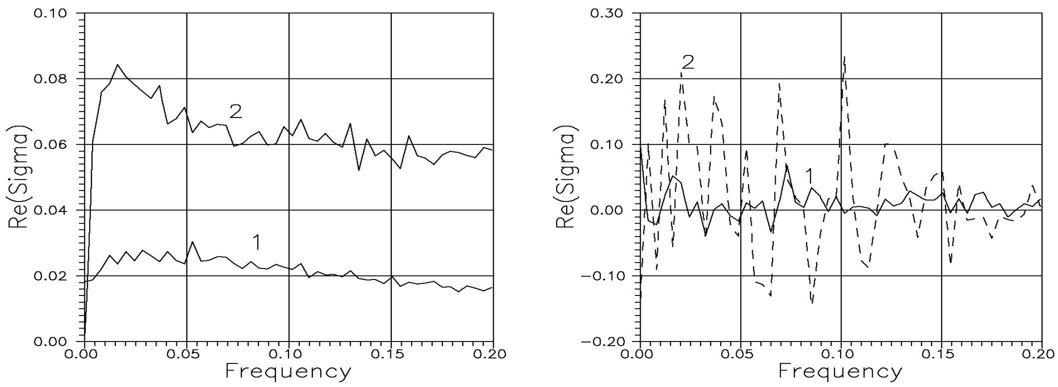


Рис. 2.7: Действительная часть преобразования Фурье автокорреляционной функции импульс-импульс в зависимости от $\hbar\omega/V_0$ для температуры $kT/V_0 = 0.04$ (a) и 0.0025 (b); 1 - приближение классических траекторий, 2 - квантовые траектории.

смысл проводимости и характеризуют омическое поглощение электромагнитных волн. Мнимые части образов Фурье определяются диэлектрической проницаемостью ϵ системы и представляют произведение $(\epsilon - 1)\omega$.

При более высоких температурах электронная проводимость (зависимости 1 и 2 на Рис. 2.7 (a)) резко убывает в окрестности нулевой частоты, что соответствует обращению ноль статической проводимости и указывает на локализацию электронов. Данное поведение характерно для андерсоновской локализации квантовых частиц.

Появление незатухающих осцилляций корреляционных функций при более низких температурах приводит к нефизическому поведению их образов Фурье. Действительно, нетрудно убедится, что изменение фазы незатухающих осцилляций может приводить к появлению отрицательных значений действительной части образа Фурье, которая имеет физический смысл проводимости. Для преодоления данного недостатка исследуемой модели необходимо учесть медленное движение тяжелых рассеивателей, которое разрушит когерентные колебания легких электронов, захваченных рассеивателями и приведет к исчезновению отдельных отрицательных значений действительной части образов Фурье.

2.2.4 Дисперсии импульса и координаты

На Рис. 2.9 (a) представлены результаты пространственной дисперсии, рассчитанной по квантовым траекториям со скачками импульсов, в зависимо-

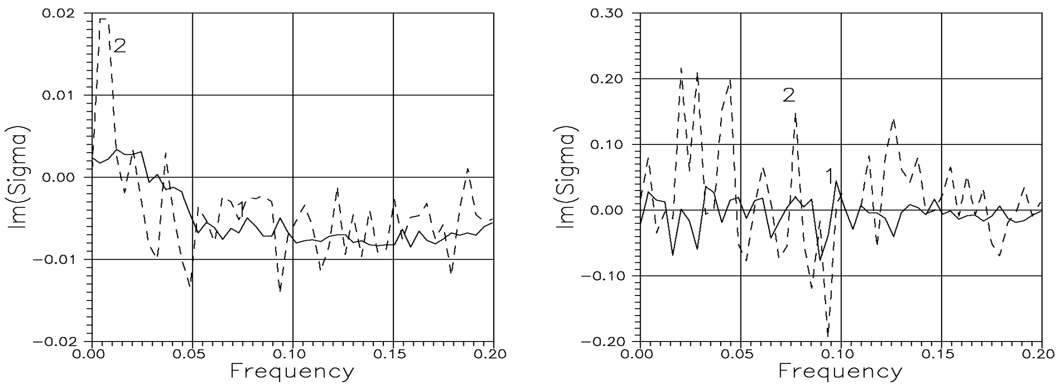


Рис. 2.8: Мнимые части преобразования Фурье автокорреляционной функции импульс-импульс в зависимости от $\hbar\omega/V_0$ для температуры $kT/V_0 = 0.04$ (a) и 0.0025 (b); 1 - приближение классических траекторий, 2 - квантовые траектории.

сти от безразмерного времени $tV_0/\hbar$ при указанных выше двух отношениях температуры к высоте потенциального барьера (kT/V_0). Зависимости 1 и 2 соответствуют отношениям kT/V_0 равным 0.04 и 0.0025 соответственно.

Как известно из литературы [71], в одномерном случае электроны должны быть локализованы, однако длина локализации зависит от энергии частиц. Как следует из анализа Рис. 2.9 (a) при более низкой температуре зависимость 2 (пространственная дисперсия) практически постоянна и для оценки длины локализации (λ) можно использовать квадратный корень этого значения, что дает $\lambda \leq 0.7$.

При более высокой температуре поведение зависимости 1 является более сложным. На начальном участке $(tV_0/\hbar \leq 100)$ зависимость 1 практически постоянна, что указывает на локализацию электронов. Аналогичная оценка длины локализации дает $\lambda \leq 1.2$. Однако на временах больших временах $(tV_0/\hbar \geq 100)$, поведение дисперсии резко меняется и становится типичным для диффузионных процессов. По нашему мнению физической причиной такого рода изменения поведения являются скачки импульса, которые могут приводить к большим величинам виртуальной энергии электронов. В результате экспоненциально редкие траектории, соответствующие большой длине локализации, могут давать экспоненциально большой вклад пространственную дисперсию, так как пространственное различие быстрых траекторий может быть экспоненциально большим для больших времен. Аналогичная проблема, связанная с экспоненциально большим вкладом экспоненциально редких событий, возникает при распространении классических волн в случай-

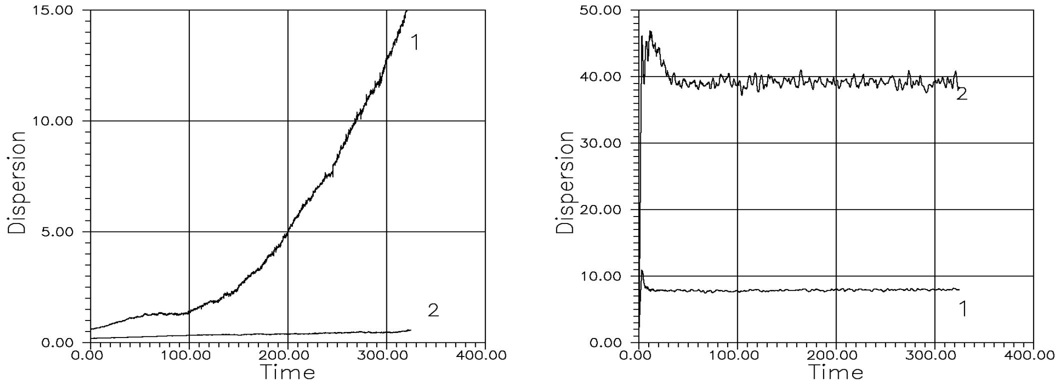


Рис. 2.9: Пространственная дисперсия D_q (a) и дисперсия импульсов электронов D_p (b) при температурах $kT/V_0 = 0.04$ (кривые 1) и 0.0025 (кривые 2).

ных средах. Известно [78], что в одномерном случае дисперсия интенсивности волн является несамоусредняемой величиной, так как экспоненциально редкие конфигурации рассеивателей могут давать экспоненциально большой вклад на достаточно большом расстоянии от источника волн.

На Рис. 2.9 (b) приведены данные по дисперсии импульса электронов в неупорядоченной системе рассеивателей. Зависимости 1 и 2 быстро стабилизируются, причем более низким температурам соответствуют большие стационарные значения.

2.2.5 Функция распределения по энергиям

Зависимость средней энергии от времени может быть рассчитана по формуле:

$$\bar{H}(t) = \frac{1}{(2\pi h)^{2v}} \int dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 \frac{1}{2} \left\{ H(p_1, q_1) + H(p_2, q_2) \right\} \times$$

$$W(p_1, q_1; p_2, q_2; t; ih\beta)$$

Проведенные вычисления показали, что эта функция в зависимости от времени практически постоянна. Для анализа флуктуаций виртуальной энергии были проведены расчеты функции распределения в простейшем квазиклассическом приближении:

$$\rho(E, \beta) =$$

$$\frac{1}{(2\pi h)^{2v}} \int_0^1 dt \int dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 \frac{1}{2} \left\{ \delta(E - H(p_1, q_1)) + \delta(E - H(p_2, q_2)) \right\} \times$$

$$W\left(p_1, q_1; p_2, q_2; t; ih\beta\right)$$

Данная функция в логарифмическом масштабе $\ln\left(\rho\left(E, \beta\right)\right)$ в зависимости от E/V_0 представлена зависимостями 1 и 2 на Рис. 2.10 (a) и (b) для более высокой и низкой температуры. Зависимость 1 получена в приближении классических траекторий (учтен только первый член итерационного ряда (1.19)). Зависимость 2 получена с учетом всех членов итерационного ряда. Для энергий $E/V_0 \leq 4$ зависимости 1 и 2 практически совпадают при обеих температурах. Однако для энергий $E/V_0 \geq 4$ различие в поведении функций распределения становится значительным. Причиной этого, по-видимому, являются скачки импульса приводящие к появлению траекторий с большой виртуальной энергией. Асимптотическое поведение функций распределения в логарифмическом масштабе может быть аппроксимировано прямыми линиями с различным наклоном. Таким образом, существование длинного экспоненциального хвоста у функций распределения подтверждает приведенное выше объяснение резкого изменения поведения пространственной дисперсии для больших времен. Дальнейшее исследование данного явления, безусловно, представляет значительный интерес. Из Рис. 2.10 (a) и (b) видно, что понижение температуры приводит к раздвоению основного пика функции распределения, а также к небольшому расширению энергетической щели на краю спектра.

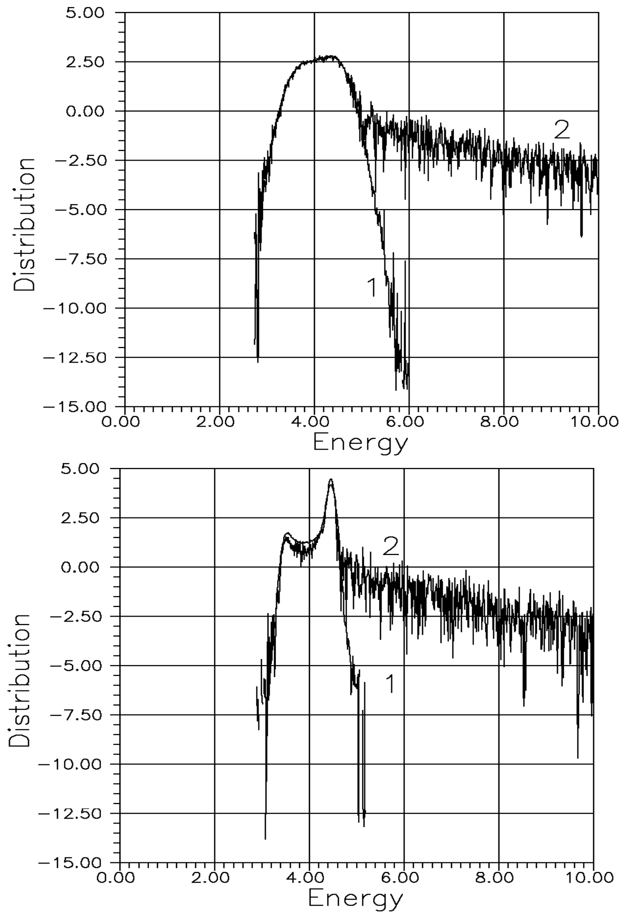


Рис. 2.10: Зависимость энергетических функций распределения от безразмерной энергии E_0/V_0 для температуры $kT/V_0 = 0.04$ (a) и 0.0025 (b); 1 - приближение классических траекторий, 2 - квантовые траектории.

Глава 3

Исследование классических и квантовых двумерных кулоновских кластеров методами Монте-Карло

В этой главе мы рассмотрим термодинамические свойства и фазовую диаграмму конечных двумерных систем электронов (ионов), удерживаемых гармоническим потенциалом. В таких системах движение частиц ограничено по всем трем пространственным направлениям. Рассматриваемые ниже классическая и квантовая модели достаточно хорошо описывают поведение ионов и пылевых частиц в радиочастотных ловушках, а также электронные системы на пленках жидкого гелия [79] и в полупроводниковых слоях [80]. Удерживающий потенциал может создаваться внешними электромагнитными полями, многослойной структурой полупроводникового элемента или металлическими контактами на которые подается напряжение. Далее мы будем считать, что рассматриваемые частицы - электроны, хотя возможность обобщения на системы других частиц очевидна.

В последние годы необычайно возрос интерес к исследованию физических явлений, происходящих в мезоскопических системах электронов (дырок) с пониженной размерностью: квантовых точках, кольцах и т.д. Это обусловлено несколькими обстоятельствами.

Во-первых, необходимость более детального изучения и более глубокого понимания физических явлений, происходящих на поверхности и в приповерхностных слоях различных веществ, возникла в связи с созданием микроэлектронных приборов. Основные рабочие характеристики этих приборов - быстродействие, надежность, потребление энергии на одно переключение - определяются именно процессами переноса вблизи поверхности, так что дальнейший прогресс микроэлектроники в значительной мере обусловлен развитием физических представлений о свойствах систем с пониженной размерностью.

Второе немаловажное обстоятельство связано с развитием прецизионных способов реализации различных микроэлектронных систем. Стало возможным изготовление с недоступной ранее точностью тонкопленочных структур типа металл-диэлектрик-полупроводник, различного рода гетеропереходов и сверхрешеток; появилась возможность создавать специальные тестовые структуры, доступные для исследовательских лабораторий, что в свою очередь привело к получению новых, неожиданных физических результатов. К числу таких новых физических результатов относятся измерения, проводившиеся в квантовых точках с заданным числом частиц [81]. Технология современного физического эксперимента позволяет контролировать число частиц в таких искусственных "атомах" и "молекулах" и детально изучать изменение физических свойств при добавлении (удалении) одной частицы. В частности, в работе [81] методом одноэлектронной емкостной спектроскопии была обнаружена сильная зависимость производной химического потенциала от числа электронов в квантовой точке. Объяснить эту зависимость можно только за счет межчастичного взаимодействия и многочастичных корреляций, оказывающих значительное влияние на энергетический спектр. Изменяя управляющие параметры искусственных атомов - плотность, заряд частиц, силу удерживающего потенциала, температуру и т.д., у экспериментаторов появляется возможность контролировать состояние системы и проводить исследования как в классическом, так и в квантовом режимах.

Для рассматриваемой ниже двумерной системы электронов применение классической модели оправдано, когда характерный размер волновой функции частицы в гармоническом потенциале $l_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ (для протяженной системы, характерный размер определяется тепловой длиной волны $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$) оказывается много меньше среднего межчастичного расстояния $\bar{r} = (\pi n)^{-1/2}$. Простые оценки показывают, что вышеперечисленным требованиям удовлетворяют системы электронов [дырок] в гетероструктурах, например, в GaAs/AlGaAs или в квантовых точках при плотностях $n < 10^7 cm^{-2} [10^8 cm^{-2}]$ и температуре $T > 1K$. В других условиях становятся необходимыми вычисления в рамках квантовой модели, для этого использовался метод квантового Монте-Карло изложенный в разделе 1.2.

В разделе 3.1 мы рассматриваем свойства кулоновских кластеров в классической области. Одной из главных причин по которой исследователи оказывают внимание системам частиц в удерживающих потенциалах, является возможность непосредственного наблюдения, например, с помощью электронного микроскопа, образования упорядоченных структур напоминающих атомы - частицы распределяются по оболочкам с разными элементами симметрии относительно центра удерживающего потенциала. С помощью физического или численного эксперимента можно детально исследовать свойства основного состояния искусственного "атома" (кластера) - последовательность образования, заполнения и симметрии оболочек по мере добавления в систему других частиц (аналог периодической таблицы Менделеева). В ходе проведенных расчетов было обнаружено, что в микрокластерах $N < 40$ в расположении частиц преобладает симметрия, присущая симметрии удерживающего потенциала. Однако с увеличением размера кластера N, внутренние частицы уже не так сильно чувствуют влияние удерживающего потенциала и выстраиваются в часть гексагональной решетки, которая является наиболее энергетически выгодным состоянием протяженной двумерной системы [82]. С повышением температуры в искусственных "атомах" (кластерах) может происходить два типа разупорядочения (т.е. система может существовать в двух фазовых состояниях). Если удерживающий потенциал обладает аксиальной симметрией, то с повышением температуры происходит ориентационное разупорядочение (плавление) оболочек "атома" [83, 84]. Ориентационное плавление проявляется в том, что разные части кластера, в данном случае оболочки, поворачиваются как целое относительно друг друга, теряя ориентационный порядок. Оказывается, что температура ориентационного плавления имеет сильную зависимость от симметрии оболочек и для разных кластеров может меняться на несколько порядков. Дальнейшее повышение температуры приводит к радиальному плавлению, при котором разные оболочки могут обмениваться частицами. Стоит, однако, отметить, что радиальное плавление не приводит к резкому разрушению оболочечной структуры - еще в достаточно широкой области температур сохраняется фаза жидкого кристалла с ярко выраженными максимумами радиальной функции распределения на расстояниях, соответствующих пространственному положению оболочек.

В разделе 3.2 мы рассматриваем свойства системы двух взаимодействующих "атомов" в параллельных слоях. Исследование электронных и ионных *протяженных* систем в связанных слоях с помощью классических [85] и квантовомеханических методов [86] позволило обнаружить образование упорядоченных структур с различными типами симметрии: вложенных треугольной, квадратной и ромбической решеток. В этих работах было показано, что переход между этими фазами происходит при определенных значениях расстояния d между связанными слоями, когда одна из решеток становится более энергетически выгодной. Этот переход может быть первого или второго рода. Принимая во внимание столь интересные теоретические предсказания для макроскопических систем, мы провели аналогичное исследование для *конечной* системы двух связанных мезоскопических кластеров. Установлено, что в зависимости от расстояния d в каждом из слоев меняется равновесная конфигурация частиц. Проанализировано влияние симметрии конфигураций на температуру радиального и ориентационного плавления. Обнаружено, что взаимодействие между кластерами приводит к дополнительной стабилизации твердой фазы и повышению температуры ориентационного и радиального плавления.

В разделе 3.3 исследуются квантовые мезоскопические кластеры. Одним из наиболее интересных явлений в этих системах является “холодное” плавление. Этот плавление происходит не за счет теплового возбуждения как в классических системах, а благодаря квантовым флуктуациям и энергии нулевых колебаний. В этом разделе мы показываем, что с ростом квантовых флуктуаций высота эффективного классического потенциального барьера для перескока частиц между оболочками уменьшается, а это в свою очередь приводит к понижению температуры радиального плавления оболочек. В плоскости безразмерного параметра температуры и параметра квантовых флуктуаций для кластеров с разным числом частиц построена фазовая диаграмма.

Основные результаты настоящей главы опубликованы в работах [102]-[104].

3.1 Классические 2D кластеры

3.1.1 Физическая модель. Специфика малых кластеров и их равновесные конфигурации

В классическом пределе ($l_0 \ll \bar{r}$) потенциальная энергия системы электронов в гармоническом потенциале записывается в виде

$$E \ = \ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i^* \omega_0^2 r_i^2 + \sum_{i<j} \frac{e^2}{\epsilon_b |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \tag{3.1}$$

где m^* и ϵ_b - эффективная масса и диэлектрическая проницаемость. Для расстояний и энергий будем использовать следующую систему единиц: r_0, определяемое выражением $e^2/\epsilon_b r_0 = m^* \omega^2 r_0^2/2$, и E_c - средняя энергия кулоновского взаимодействия, $E_c = e^2/\epsilon_b r_0$. После масштабных преобразований

$\{r \to r/r_0,\ E \to E/E_c\}$ выражение (3.1) примет вид

$$E = \sum_{i=1}^{N} r_i^2 + \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \qquad (3.2)$$

Для исследования термодинамических свойств введем безразмерную температуру

$$T = k_B T / E_c \qquad (3.3)$$

Впервые конфигурации основного состояния кулоновских кластеров и их плавление были исследованы в [87]-[92]. В настоящей диссертации для поиска конфигураций, обеспечивающих системе глобальный минимум по энергии, использовался *стандартный алгоритм Метрополиса + метод градиентного спуска* [93]. При поиске конфигураций основного состояния очень важно, чтобы найденные конфигурации действительно обеспечивали функции потенциальной энергии (3.2) глобальный минимум, а не являлись локальными минимумами. Поиск конфигураций основного состояния для кластеров с $N > 40$ значительно усложняется, так как число локальных минимумов растет вместе с числом частиц, при этом каждый локальный минимум имеет свою область сходимости, т.е. вероятность обнаружить данную конфигурацию среди нескольких независимых статистических экспериментов (независимость понимается в том смысле, что поиск минимума функции (3.2) начинается со случайной начальной конфигурации частиц). Вероятность того, что найденная конфигурация обеспечивает глобальный минимум энергии существенно уменьшается, если область сходимости глобального минимума оказывается значительно меньше области сходимости локальных минимумов. В этом случае единственный выход - начинать поиск минимума с большего числа независимых начальных конфигураций. В Табл. 3.1 мы приводим найденные нами для двумерных кулоновских кластеров конфигурации глобальных и локальных минимумов, а также соответствующие им значения энергии.

Добавление в систему электронов приводит к изменению числа частиц на разных оболочках. Если рассматривать последовательность конфигураций с увеличением N (см. Табл. 3.1), то при определенных числах N, когда число электронов на оболочках достигает некоторого максимально возможного значения, начинается формирование новой оболочки - в центре системы появляется один, два, три, и т.д. электрона. Из данных Табл. 3.1 можно проследить следующие закономерности при заполнении оболочек:

Таблица 3.1: Конфигурации основного состояния и локальные минимумы двумерных кулоновских кластеров в аксиально симметричном параболическом потенциале. N - число частиц в системе; $\{n_1, n_2, \ldots\}$ - числа заполнения оболочек; Cr_c - концентрические группы узлов идеального 2D кристалла; $\varepsilon_N = E/N$ - удельная энергия.

N	$\{n_1, n_2, \ldots\}$	Cr_c	ϵ	N	$\{n_1, n_2, \ldots\}$	Cr_c	ε_N
1	1		0.000000	28	4,10,14	Cr_4	10.33562
2	2		0.750000	29	4,10,15		10.61807
3	3		1.310373		5,10,14		10.61926
4	4		1.835448		4,11,14		10.62043
5	5		2.338448	30	5,10,15		10.89732
6	1,5		2.804558		4,11,15		10.89852
7	1,6	Cr_1	3.238977		1,5,10,14		10.89999
8	1,7		3.668906	31	5,11,15		11.17388
9	2,7		4.088112		5,10,16		11.17559
10	2,8	Cr_2	4.484945	32	1,5,11,15		11.44658
	3,7		4.488165		5,11,16		11.44793
11	3,8		4.864671	33	1,6,11,15	Cr_1	11.71564
12	3,9	Cr_3	5.238938	34	1,6,12,15	Cr_1	11.98263
13	4,9		5.601140		1,6,11,16		11.98289
14	4,10	Cr_4	5.958984	35	1,6,12,16	Cr_1	12.24694
15	5,10		6.307585		1,6,13,15		12.25101
16	1,5,10		6.649906	36	1,6,12,17	Cr_1	12.51081
	5,11		6.652355		1,7,12,16		12.51106
17	1,6,10	Cr_1	6.982906		1,6,13,17		12.51243
	1,5,11		6.984330	37	1,7,13,16		12.77238
18	1,6,11	Cr_1	7.308144		1,6,13,17		12.77322
19	1,6,12	Cr_1	7.631931	38	1,7,13,17		13.03045
	1,7,11		7.632804		2,8,13,15		13.03251
20	1,7,12		7.949615	39	2,8,12,17	Cr_2	13.28790
21	1,7,13		8.265881	40	2,8,13,17		13.54192
	2,7,12		8.266452		2,8,*13*,17		13.54193
22	2,8,12	Cr_2	8.574177		2,8,*13*,17		13.54225
23	2,8,13	Cr_2	8.877583	41	2,8,14,17	Cr_2	13.79397
	2,9,12		8.878591		3,8,*13*,17		13.79437
24	3,8,13		9.175908		2,8,13,18		13.79455
	3,9,12		9.177565		3,8,*13*,17		13.79473
25	3,9,13	Cr_3	9.470796	42	3,8,14,17		14.04396
	3,8,14		9.472918		3,9,13,17		14.04400
	4,8,13		9.474849		2,8,14,18		14.04421
26	3,9,14	Cr_3	9.762727	43	3,9,14,17	Cr_3	14.29154
	4,9,13		9.763832		3,8,14,18		14.29192
27	4,9,14		10.05086	44	3,9,14,18	Cr_3	14.53753
	4,10,13		10.05273	45	3,9,15,18	Cr_3	14.78192

1. Разница между числом частиц ΔN на двух последовательных внутренних оболочках находится в пределах: $3 \leq \Delta N \leq 6$.

2. Число частиц на первой оболочке никогда не превосходит 5-ти.

3. Разница между числом частиц на внешних оболочках стремится быть минимальной.

4. Увеличение числа частиц на внутренней оболочке происходит в случае, когда разница между числом частиц на всех остальных оболочках приближается к максимально допустимым значениям, например, $\{6, 5, 5, \ldots\}$.

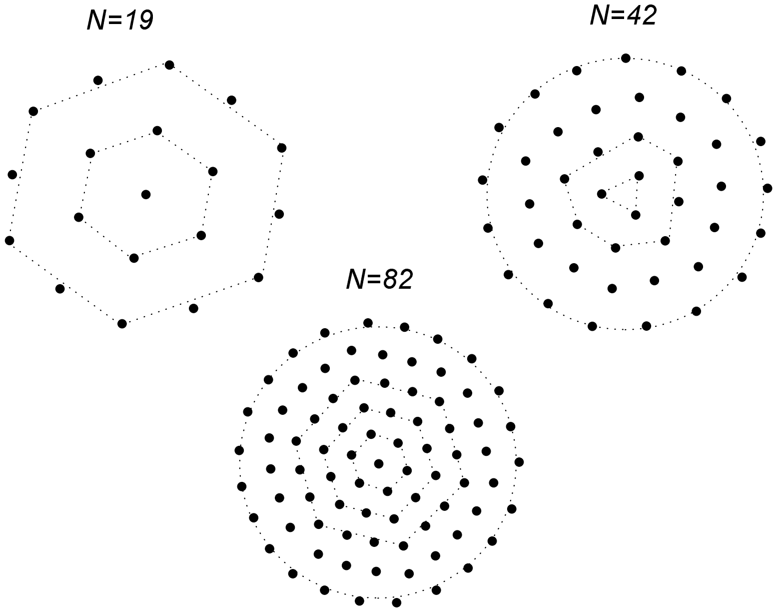


Рис. 3.1: Равновесные конфигурации кластеров $N = 19$, $N = 42$ и $N = 82$. Пунктирные линии показывают симметрию гексагональной решетки и аксиально симметричных оболочек. Температура $T = 1.0 \times 10^{-6}$.

Как показывает анализ большинства конфигураций, при $N > 40$ у внутренних электронов кластера есть тенденция к образованию идеальной решетки с гексагональной симметрией. При описании и анализе свойств таких конфигураций представляется удобным ввести в рассмотрение “кристаллические оболочки” (Cr_c) - концентрические группы узлов идеального 2D кристалла, в центре которых находится c частиц (см. Табл. 3.1). Симметрия решетки нарушается по мере приближения к периферии кластера, где в расположении электронов начинает преобладать аксиальная симметрия в силу изотропии удерживающего потенциала. Эти тенденции можно проследить на примере конфигураций на Рис. 3.1. Почти у всех внутренних электронов координационное число $C = 6$, а у электронов с внешних оболочек $3 \leq C \leq 6$. Кластеры с максимальным количеством электронов, у которых $C = 6$, обладают повышенной угловой симметрией (см. Табл. 3.1). Эти конфигурации принято называть “магическими” кластерами и они обладают особыми свойствами. В “магических” кластерах число частиц на разных оболочках имеет общий делитель, т.е. оболочки являются соизмеримыми. Это происходит, например, в кластерах $N = 10\{2, 8\}$, $12\{3, 9\}$, $17\{1, 6, 10\}$, $19\{1, 6, 12\}$, $34\{1, 6, 12, 15\}$.

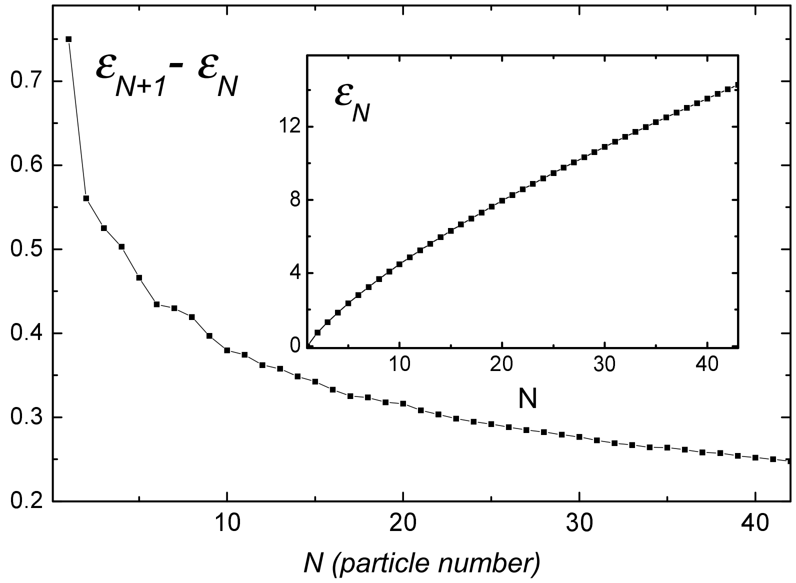


Рис. 3.2: Зависимость удельной энергии ε_N и ее первой производной $\Delta\varepsilon_N = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N$ от размера кластера N. Температура $T = 1.0 \times 10^{-6}$.

Обнаружить “магические” числа N можно, например, с помощью графиков второй производной от удельной энергии $\varepsilon_N = E/N$ (см. Рис. 3.3), где при некоторых числах N вторая производная принимает максимальные значения (наличие других не так сильно выраженных максимумов производной на “немагических” числах N будет объясняться ниже). Интересно, что в кулоновских кластерах, в отличии от кластеров с короткодействующим потенциалом взаимодействия, удельная энергия ε_N и ее первая производная $\Delta\varepsilon_N = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N$ оказываются не настолько чувствительными к симметрии конфигураций и числам заполнения оболочек, т.е. как функции числа частиц они не имеет никаких особенностей (см. Рис. 3.2).

Другим интересным свойством магических кластеров является их повышенная стабильность к ориентационному плавлению. Увеличение числа частиц в кластере приводит к изменению структуры нижайших возбужденных состояний системы - характер движений, соответствующий нижайшей ненулевой собственной частоте колебаний. Несколько примеров собственных векторов таких колебаний приводится, например, в работе [83]. Как правило, нижайшим возбуждениям соответствует относительное вращение оболочек. Магические кластеры с соизмеримыми числами заполнения оболочек имеют наибольшую частоту колебаний ω_{max}, и в следствие этого значительно более высокую температуру ориентационного плавления. Попытаемся теперь объяснить причину возникновения максимумов на графике второй производной удельной энергии (Рис. 3.3). Для этого обратимся к Рис. 3.4, где представлена зависимость среднего межчастичного расстояния на оболочках (кривые 1-4) от чисел N. Особо выделены числа частиц N для которых необходимо провести сопоставление с Рис. 3.3. Нетрудно заметить, что для выделенных чисел N в интервале $12 \leq N \leq 32$, характерно резкое уменьшение межчастичного расстояния (увеличение плотности) на второй оболочке при переходе к следующей конфигурации $N+1$. Аналогичное наблюдение, но для межчастичного расстояния на первой оболочке можно сделать для чисел $N \leq 6$ и $N \geq 34$. Резкое уменьшение расстояния $\bar{r}_N \rightarrow \bar{r}_{N+1}$ должно проявлять себя в виде особенностей второй производной удельной энергии.

Из зависимостей представленных на Рис. 3.4 хорошо видно, что среднее межчастичное расстояние в кластере зависит от номера оболочки или расстояния до центра системы (на Рис. 3.4 отсчет идет от внешней оболочки). Плотность системы увеличивается при приближении к ее центру и уменьшается на границе. Таким образом, в кластере плотность - понятие не определенное, которое не выражается через естественную для макроскопических систем единицу длины $\bar{r} = 1/\sqrt{\pi n}$. Однако для кластеров можно ввести понятие усредненной плотности, например, $\bar{n} = N/\pi R^2$, где R - радиус кластера. Можно также использовать более общее определение, $\bar{n} = 1/\pi\tilde{r}^2$, где $\tilde{r}$ - первый максимум двухчастичной функции распределения $f(r_i - r_j)$. В настоящей работе мы будем придерживаться этого определения и в случае квантовых систем.

Рассмотрим теперь зависимость радиуса разных оболочек R_i от чисел N (Рис. 3.5). Изменение значений производной $\partial R_i(N)/\partial N, \;\; i = 1, \ldots, 4$ позволяет проследить последовательность заполнения оболочек в кластерах. Если значение производной на оболочке i не меняется при увеличении $N \rightarrow N+1$,

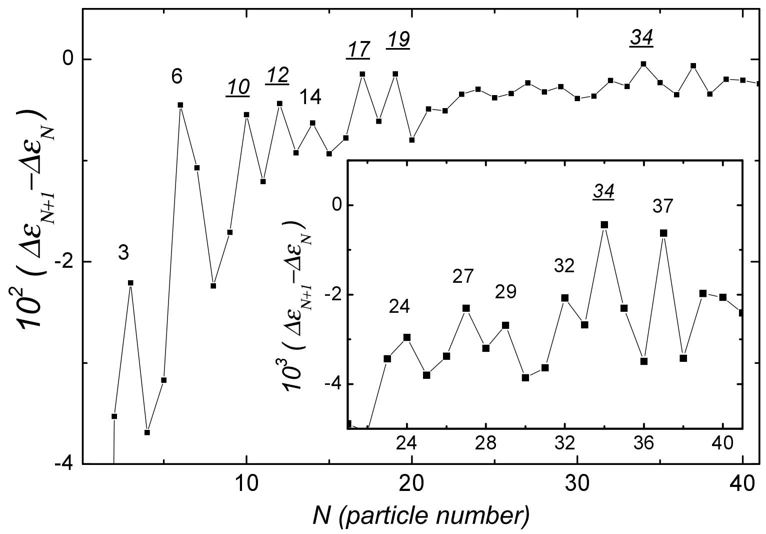


Рис. 3.3: Зависимость второй производной удельной энергии $\Delta^2\varepsilon_N = \Delta\varepsilon_{N+1} - \Delta\varepsilon_N$ от размера кластера N. Температура $T = 1.0 \times 10^{-6}$.

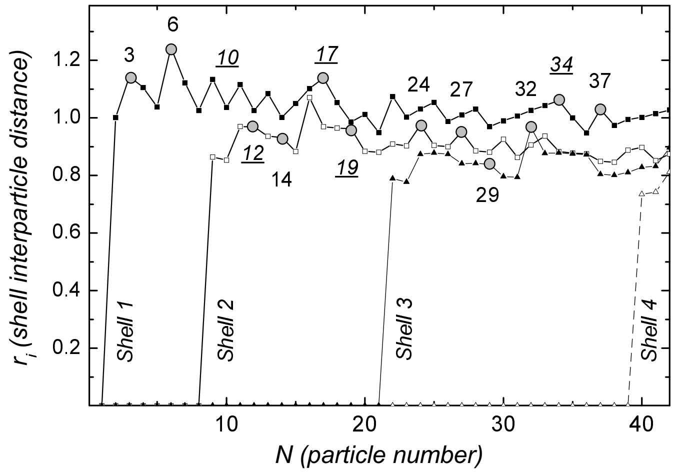


Рис. 3.4: Зависимость среднего межчастичного расстояния $\bar{r}_i(N)$ на оболочках $i = 1, \ldots, 4$. Выделены кластеры с числом частиц N, соответствующие максимумам второй производной от удельной энерегии. Температура $T = 1.0 \times 10^{-6}$.

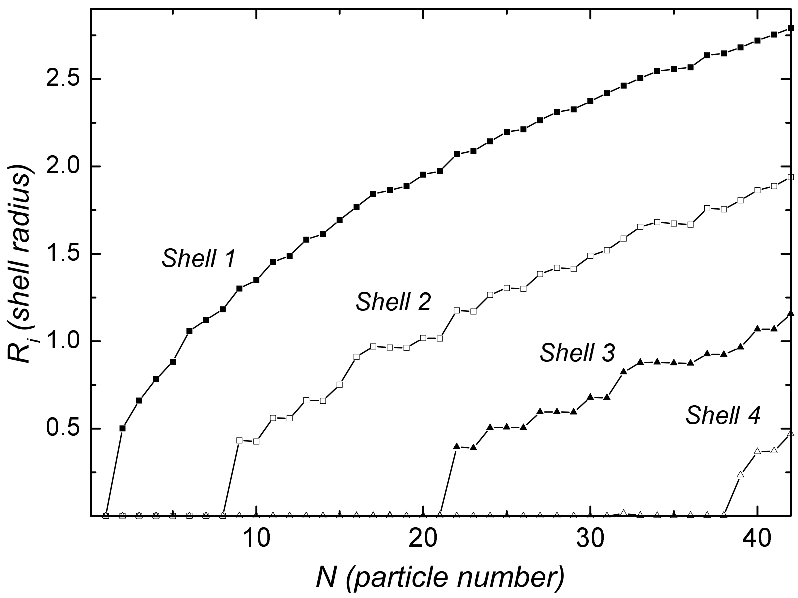


Рис. 3.5: Зависимость радиуса оболочек $R_i(N)$, $i = 1, \ldots, 4$, от размера кластера N.

то число и частиц на данной оболочке не претерпевает изменений. Если же заселенность оболочки i увеличивается, то радиус этой оболочки возрастает, и в следствии этого растет значение производной $\partial R_i(N)/\partial N$.

Рассмотрим теперь подробнее процессы разупорядочения в кластерах и способы их исследования.

3.1.2 Равновесная термодинамика и фазовые переходы

При исследовании термодинамических свойств кластеров в зависимости от параметра неидельности Γ (см. ниже) рассчитывались следующие величины:

- Радиальная и парная корреляционная функция межчастичных и угловых расстояний:

$$f(r) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle\delta(r - \{r_i - r_c\})\rangle, \tag{3.4}$$

$$g_{ij}(r) = \frac{2}{N(N-1)}\sum_{i\leq j}\langle\delta(r - \{r_i - r_j\})\rangle, \tag{3.5}$$

$$g_s(r) = \frac{2}{n_s(n_s-1)}\sum_{i\leq j}^{n_s}\langle\delta(\phi - \{\phi_j - \phi_i\})\rangle, \tag{3.6}$$

где r_c - положение центра ловушки; $r_{i(j)}$ - радиус вектор частицы $i(j)$; ϕ_i и

ϕ_j -угловые положения частиц на оболочке s; n_s - заселенность оболочки.

- Внутренняя и кинетическая энергии, давление и теплоемкость:

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}lnZ, \quad K = \frac{m}{\beta}\frac{\partial}{\partial m}lnZ, \tag{3.7}$$

$$P = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial V}lnZ, \quad C_v = k_B\beta^2\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}lnZ, \tag{3.8}$$

где Z - статистическая сумма; $\beta = 1/kT$ - обратная температура.

- Удельная энергия на один электрон, первая и вторая производные:

$$\varepsilon_N = \frac{E}{N}, \quad \Delta\varepsilon_N = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N, \quad \Delta^2\varepsilon_N = \Delta\varepsilon_{N+1} - \Delta\varepsilon_N, \tag{3.9}$$

где E - полная внутренняя энергия системы N частиц.

- Относительные парные флуктуации угловых, межчастичных и радиальных расстояний:

$$u_\phi = \frac{2}{m_{s_1}m_{s_2}}\sum_i^{m_{s_1}}\sum_j^{m_{s_2}}\sqrt{\frac{\langle|\phi_j - \phi_i|^2\rangle}{\langle|\phi_j - \phi_i|\rangle^2} - 1}, \tag{3.10}$$

$$u_{pair} = \frac{2}{N(N-1)}\sum_{i\leq j}\sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2\rangle}{\langle r_{ij}\rangle^2} - 1}, \; u_r = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sqrt{\frac{\langle(r_i - r_c)^2\rangle}{\langle(r_i - r_c)\rangle^2} - 1} \tag{3.11}$$

где ϕ_i и ϕ_j - угловые положения частиц на оболочках s_1 и s_2; m_{s_1}, m_{s_2} - полное число частиц оболочках; r_{ij} - расстояние между частицами i и j.

Возможность существования кристаллической фазы в классической протяженной системе принято характеризовать безразмерным параметром взаимодействия Γ (см. например [92]). Этот параметр определяется как отношение двух характерных энергий системы - средней потенциальной энергии взаимодействующих частиц $e^2\sqrt{\pi n}$ и средней кинетической энергии k_BT. В разреженных системах при высоких температурах параметр Γ мал ($\Gamma < 1$) и кулоновское взаимодействие не играет важной роли. При промежуточных плотностях ($1 < \Gamma < 100$) движение электронов сильно скоррелированно и подобно движению жидкости. При более высоких плотностях электронов и низких температурах ($\Gamma > 100$) кулоновское взаимодействие играет определяющую роль и возможен фазовый переход в состояние с периодическим пространственным распределением носителей заряда, т.е. образуется вигнеровский кристалл.

По аналогии с макроскопическими системами для характеристики термодинамического состояния кластеров введем параметр Γ как отношение двух характерных энергий (r_0 - единица длины в нашей системе единиц)

$$\Gamma = \frac{e^2/\epsilon r_0}{k_B T} = \frac{1}{T} \tag{3.12}$$

Он отличается от параметра Γ макроскопической системы заменой $\{\bar{r} = 1/\sqrt{\pi n} \to r_0\}$. В разделе 3.1 мы уже говорили о том, что в кластерах межчастичное расстояние испытывает значительные флуктуации и необходимо вводить усредненную характеристику $\tilde{r}$, например, как первый максимум парной функции распределения. Как показали результаты расчетов, для разных чисел N параметр r_0 оказывается очень хорошей оценкой среднего межчастичного расстояния $\tilde{r}$ и его отличие от первого максимума парной корреляционной функции не превосходит 10%. Таким образом, как и макроскопических системах, плавление в классических кластерах будем характеризовать параметром Γ или обратной величиной $T = 1/\Gamma$ (3.3).

При низких температурах ($\Gamma \gg 1$) электроны хорошо локализованы вблизи своих положений равновесия, а отклонения из этих положений малы по сравнению с межчастичным расстоянием. Интересно, что в конечных системах во внешних полях эти отклонения, как правило, анизотропные. В наибольшей степени эти проявляется в малых кластерах и в больших кластерах для электронов на внешних оболочках. В кластерах, где в расположении электронов преобладает угловая симметрия, угловая составляющая флуктуаций значительно превосходит радиальную. Анизотропия флуктуаций в кулоновских кластерах проявляет себя в том, что температура ориентационного плавления оказывается всегда значительно меньше температуры радиального плавления оболочек.

Одним из методов определения температуры ориентационного и радиального плавления является критерий Линдемана. В этом критерии исследуются температурные зависимости среднеквадратичных флуктуаций, чувствительных к разупорядочению частиц. Считается, что в системе происходит плавление, если средние отклонения $\langle u^2 \rangle = \langle \Delta r^2 \rangle / \bar{r}^2$ ($\bar{r} = 1/\sqrt{\pi n}$) приближаются к некоторому критическому значению γ_c. Однако для 2D кристаллов этот критерий не универсален, так как величина $\langle u^2 \rangle$ расходится логарифмически с размером системы L. По этой причине принято рассматривать относительные флуктуации соседних частиц. Эта величина всегда принимает конечные значения, и именно она используется в модифицированном критерии Линдемана для 2D систем.

Воспользуемся модифицированным критерием и будем определять температуру ориентационного плавления оболочек s_1 и s_2, как температуру при которой происходит резкий рост флуктуаций относительных угловых (3.10) или межчастичных (3.11) расстояний. Как показывают расчеты вблизи точки плавления величина флуктуаций (3.10) и (3.11) возрастает в несколько раз.

На Рис. 3.6 показаны температурные зависимости угловых u_ϕ (3.10), межчастичных u_{pair} и радиальных u_r (3.11) флуктуаций для кластеров с $N = 10, 16, 19$. Для каждого значения N можно выделить две температуры при которых наблюдается резкий рост флуктуаций. Более низкой температуре соответствует значительный рост угловых и межчастичных флуктуаций, в то время как значение радиальных флуктуаций меняется лишь на несколько процентов (этот незначительный рост связан с радиальной деформацией оболочек кластера при их взаимном вращении). Рост радиальных флуктуаций u_r происходит при значительно более высоких температурах. Такое поведение флуктуаций свидетельствует о возможности относительного вращения оболочек до того момента, как происходит полное радиальное плавление. Интересно, что из-за изотропии внешнего потенциала ориентационное плавление, которое отсутствует в протяженных системах, можно наблюдать даже в кластерах с $N \approx 1000$, но только для частиц на внешних оболочках. Частицы в центральной области кластера расположены в узлах гексагональной решетки и сохраняют свой ориентационной порядок вплоть до температуры полного плавления.

Сравнение температур ориентационного и радиального плавления для разных кластеров показывает, что они сильно зависят от числа частиц N (см. Табл. 3.2). Так например, температура ориентационного плавления в разных кластерах может отличаться на несколько порядков, $T_o \approx 3 \times 10^{-3} \ldots 10^{-12}$. Ориентационная устойчивость оболочек сильно зависит от их чисел заполнения. Наиболее высокие температуры ориентационного плавления были найдены для *магических* кластеров (см. Табл. 3.2). Особенно выделяется высокая устойчивость кластера с $N = 19$, у которого температура ориентационного плавления, $T_o \approx 3 \times 10^{-3}$, всего в два раза меньше температуры радиального плавления, $T_r \approx 6.5 \times 10^{-3}$. Это связано с тем, что число частиц на трех оболочках в этом кластере оптимально для формирования треугольной решетки (см. Рис. 3.1). С другой стороны у немагических кластеров, у которых число

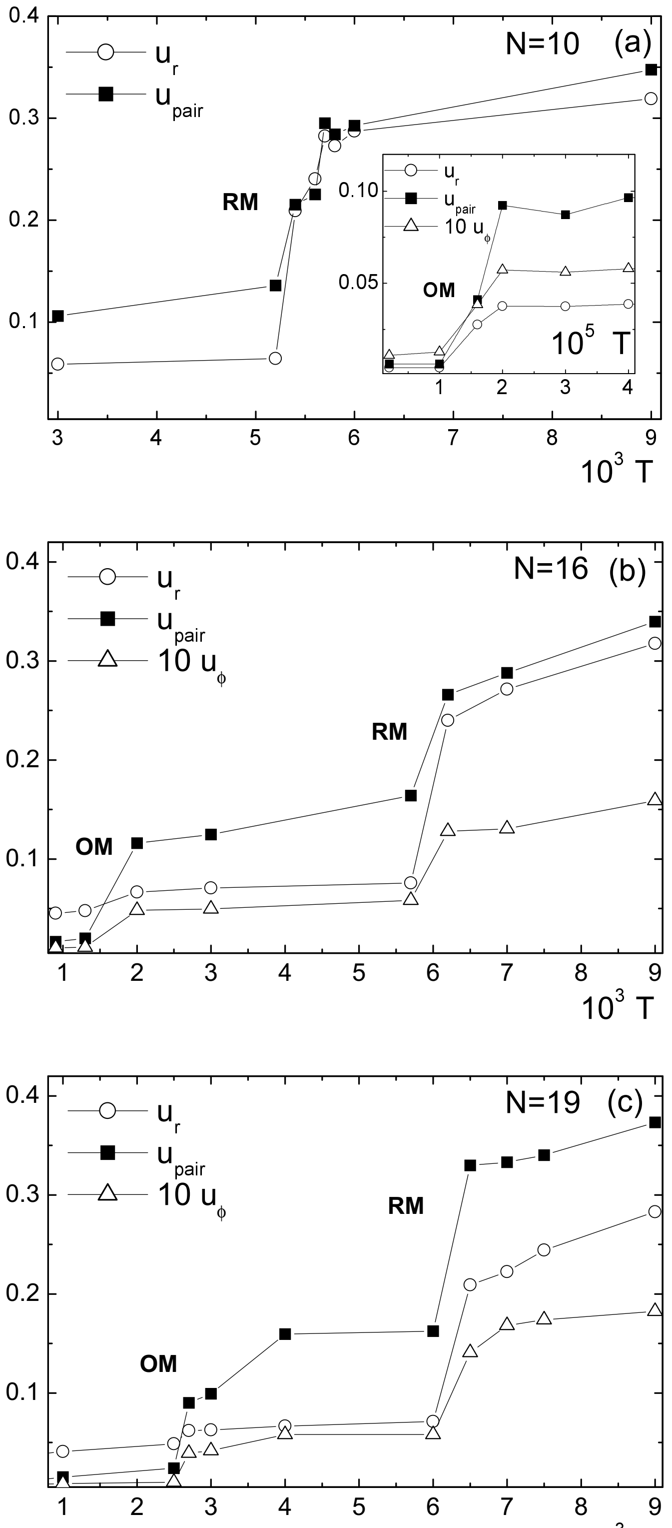


Рис. 3.6: Поведение угловых u_ϕ (3.10), межчастичных u_{pair} и радиальных u_r (3.11) флуктуаций вблизи ориентационного (OM) и радиального (RM) плавления для кластеров с числом частиц $N = 10$(a), 16(b), 19(c).

частиц на оболочках является несоизмеримым, температура ориентационного плавления оказывается на несколько порядков меньше температуры полного плавления (см. Табл. 3.2). Особенно удивительна ориентационная нестабильность кластера с $N = 20$.

Критическая температура радиального плавления, напротив, оказывается не такой чувствительной к угловой симметрии оболочек или магичности кластера. Здесь отличие между температурами радиального разупорядочения в магических и немагических кластерах не превосходит фактора 2 (Табл. 3.2). Интересная особенность температуры радиального плавления $T_r(N)$ это ее немонотонная зависимость от чисел N. По-видимому, такая немонотонность связана с несколькими факторами.

Во-первых, кластер из N частиц можно рассматривать как часть сильно деформированной кристаллической решетки. Таким образом, исследуется плавление части деформированного кристалла с различными топологическими дефектами, при этом температура плавления будет функцией числа этих дефектов. В больших кластерах дефекты возникают главным образом на границе раздела областей с гексагональной и аксиальной симметрией. Очевидно, что число дефектов будет минимально в случае "магических" кластеров с максимально заполненными кристаллическими оболочками. По этой причине температура плавления "магических" кластеров оказывается ближе всего к температуре плавления макроскопических систем $T_r^\infty \approx 1/137 = 7.3 \times 10^{-3}$ [79] (см. Табл. 3.2).

Второй причиной немонотонности температуры $T_r(N)$ является неоднородность плотности кластера на разных оболочках в зависимости от чисел N. Как следует из результатов расчетов на Рис. 3.4, среднее межчастичное расстояние на внешних оболочках $\bar{r}^{out}$ кластера оказывается несколько больше, чем на внутренних $\bar{r}^{in}$. По этой причине имеет место следующее соотношение

$$\Gamma^{out} = \left(\frac{e^2/\epsilon\bar{r}^{out}}{k_B T}\right) < \Gamma^{in} = \left(\frac{e^2/\epsilon\bar{r}^{in}}{k_B T}\right), \tag{3.13}$$

т.е. для внешних оболочек параметр кристаллизации Γ^{out} меньше аналогичного параметра Γ^{in} для внутренних оболочек. Следовательно, на переферии кластера можно ожидать наибольшее значение флуктуаций $\langle u^2 \rangle$ и более низкую температуру плавления, по сравнению с температурой плавления внутренней области. Как показывает более подробный анализ наибольшие флуктуации наблюдаются у электронов вблизи границы перехода от гексагональной к аксиальной симметрии. Это заключение можно наглядно продемон-

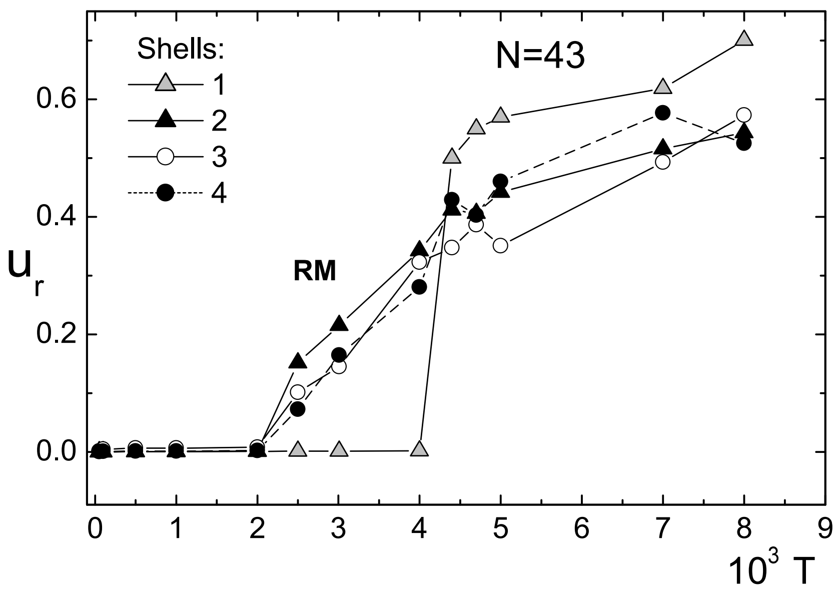


Рис. 3.7: Четырехоболочечный кластер $N = 43\{3, 9, 14, 17\}$. Температурная зависимость радиальных флуктуаций (3.11).

стрировать радиальным плавлением четырехоболочечного кластера $N = 43$. На Рис. 3.7 представлена зависимость радиальных флуктуаций, вычисленная отдельно для каждой из четырех оболочек. Можно выделить две температуры плавления: $T_1 \approx 2 \times 10^{-3}$ - плавление внешних оболочек 2,3 и 4, $T_2 \approx 4.5 \times 10^{-3}$ - плавление первой оболочки. Таким образом, в кластере $N = 43$ температуры плавления внешней и внутренней областей отличаются более чем в 2 раза, а радиальное плавление происходит в две стадии и занимает конечный температурный интервал $0.002 \leq T_r \leq 0.005$.

Переход кластера от упорядоченного к разупорядоченному состоянию влияет также парные и радиальные функции распределения. На Рис. 3.8 приведены результаты расчета для кластера с $N = 19$ в интервале температур $T = 1.0 \times 10^{-3} \ldots 1 \times 10^{-2}$. Радиальные функции распределения получены путем усреднения по угловому положению частиц. При этом усреднении частицы имеющие гексагональную симметрию, как например в кластере $N = 19$, находятся на разных расстояниях от центра системы (см. Рис. 3.1). По этой причине на месте третьей оболочки возникает два максимума. Интересно отметить, что функции распределения достаточно плавно меняются с температурой. С увеличением T амплитуда флуктуаций частиц из равновесных положений растет, и это приводит к уширению оболочек в радиальном направлении. Начиная с некоторого момента радиальные функции распре-

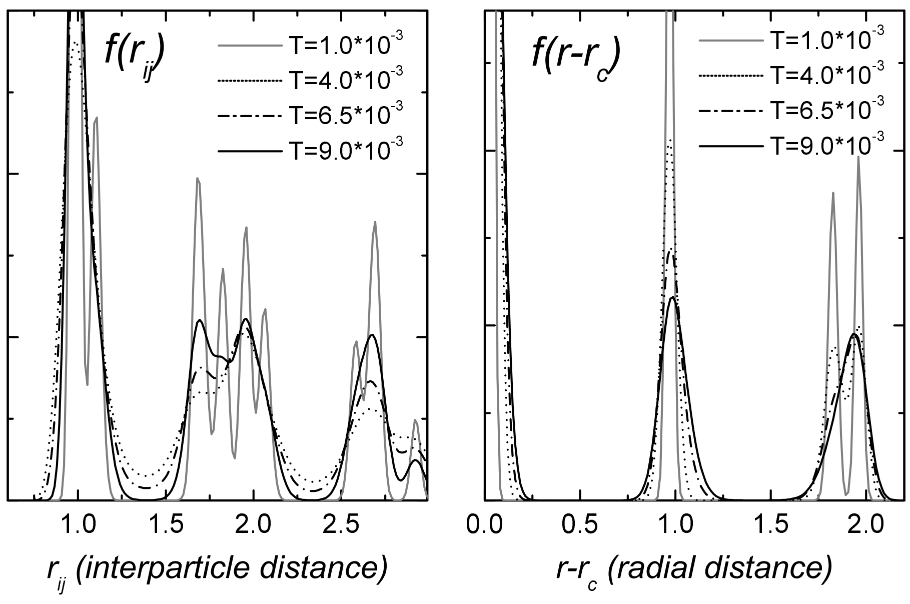


Рис. 3.8: Парные $f(r_{ij})$ и радиальные $f(r - r_c)$ функции распределения кластера $N = 19\{1, 6, 12\}$ в интервале температур $1.0 \times 10^{-3} \leq T \leq 1 \times 10^{-2}$. Критическая температура радиального плавления $T_r = 6.5 \times 10^{-3}$.

деления разных оболочек начинают перекрываться и оболочки могут обмениваться частицами. Интересно установить зависимость между критическим значением перекрытия функций распределения и температурой плавления. Для этого введем понятие потенциального барьера.

3.1.3 Радиальные и угловые потенциальные барьеры между оболочками

При плавлении кластеров разные частицы обмениваются своими равновесными положениями на оболочках. При этом обмене частицам приходится преодолевать некоторые потенциальные барьеры. Так процесс радиального плавления можно рассматривать как преодоление барьера перескока между оболочками, а ориентационное плавление как одновременное прохождение всех частиц одной оболочки через угловой барьер поворота данной оболочки относительно соседней.

Особый интерес представляет исследование барьеров в квантовых кластерах (см. раздел 3.3.2). Здесь использование понятия эффективного классического барьера (3.32) приводит к тому, что форма радиальных и угловых барьеров начинает зависеть от двух независимых параметров системы - тем-

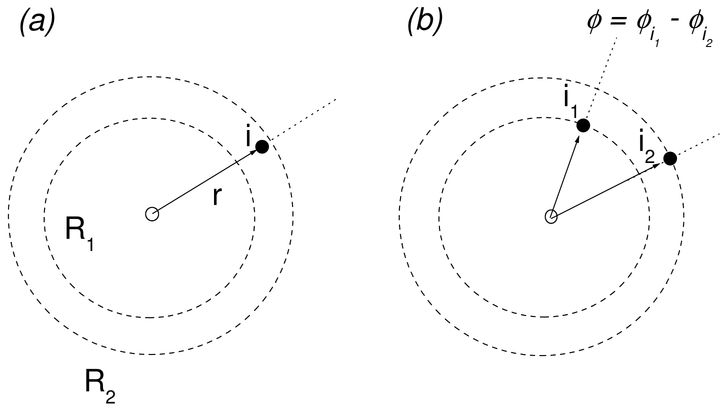


Рис. 3.9: Положения частиц при вычислении (a) радиальных и (b) угловых барьеров.

пературы и параметра квантовых флуктуаций. Как показали проведенные вычисления (см. раздел 3.3.2), когда параметр квантовых флуктуаций превышает некоторые критические значения происходит полное исчезновение сначала углового, а затем и радиального барьера перескока между оболочками. Исчезновение барьеров объясняет двухстадийный процесс "холодного" (при нулевой температуре) плавления кластеров.

Изучение барьеров начнем с классического случая. Опишем методы вычисления радиальных и угловых барьеров.

Для радиальных барьеров естественно использование следующей процедуры. Зафиксируем все частицы в конфигурации, отвечающей глобальному минимуму потенциальной энергии. Выбирем одну из частиц и будем передвигать ее в радиальном направлении от центра (или к центру) системы с некоторым шагом dr (см. Рис. 3.9(a)). На каждом шаге будем вычислять значение полной энергии системы $E(r)$. Будем повторять эту процедуру, пока передвигаемая частица не пройдет расстояние равное радиусу кластера и не побывает на всех оболочках. Поведение функции $E(r)$ будет характеризовать потенциальный барьер перескока частицы "меняющей оболочки". Стоит отметить недостаток данного метода - он дает завышенное значение потенциального барьера, поскольку не принимает во внимание "релаксацию" положений остальных частиц, которое обязательно будет происходить в реальных системах. Для расчета с учетом релаксации, т.е. подстройки остальных частиц, в наших расчетах после каждого шага dr находилось среднее значение потенциальной энергии системы при фиксированной температуре T и расстоянии r от передвигаемой частицы до центра системы

$$E(r;\beta) = \int \delta(|\vec{r}_i| - r)\, V(\vec{R})\, \rho(\vec{R},\vec{R};\beta)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N, \qquad V(\vec{R}) = \sum_{k<j} u(\vec{r}_k,\vec{r}_j), \tag{3.14}$$

где $\vec{R} = \{\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N\}$ - $(d\cdot N)$-мерный радиус вектор (d - размерность пространства), $\rho(\vec{R},\vec{R};\beta)$ - матрица плотности классической системы, i - передвигаемая частица, центр системы координат совпадает с центром ловушки. Значение r менялось в пределах $(0,R_0)$; R_0 - характерный размер кластера. Интеграл (3.14) вычислялся с помощью метода Монте-Карло (см. раздел 1.2) с длиной марковской цепи $\approx 10^5$. Функция $E(r;\beta)$ будет принимать минимальные значения, когда расстояние r будет совпадать с радиусом одной из оболочек. При расчете с учетом "релаксации", по мере перехода частицы i на новую оболочку происходит вытеснение (на каждом шаге dr) одной из частиц с этой новой оболочки. Вытесняемая частица будет переходить на прежнюю оболочку частицы i, чтобы обеспечить минимум полной энергии системы, т.е. имеет место соотношение

$$E(R_1;\beta) = \ldots = E(R_M;\beta), \quad j = 1,\ldots,M,$$

где R_j - радиус j-ой оболочки кластера. Таким образом, радиальный барьера перескока можно определить как

$$U(r;\beta) = E(r;\beta) - E(R_j;\beta), \quad r \in (0,R_0) \tag{3.15}$$

Как показали расчеты, величина барьера $U(r;\beta)$ почти не меняется при температурах ($T = 1/\beta$) меньше или порядка критической температуры плавления.

Для нахождения угловых барьеры использовалась аналогичная процедура. В конфигурации отвечающей глобальному минимуму выбирались две ближайшие частицы i_m, i_{m+1} с двух соседних оболочек. Угловое положение этих частиц фиксировалось относительно некоторой оси, проходящей через центр системы (см. Рис. 3.9(b)), на радиальную составляющую перемещения ограничений не накладывалось. Таким образом вычисление полной потенциальной энергии системы проходило при некотором фиксированном угловом расстоянии ϕ между выбранными частицами. Как и в случае с радиальным барьером, вычисление средней энергии проходило с учетом релаксации всех остальных частиц

$$E(\phi;\beta) = \int \delta\{(\phi_{i_m} - \phi_{i_{m+1}}) - \phi\}\, V(\vec{R})\, \rho(\vec{R},\vec{R};\beta)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N, \qquad (3.16)$$

где $\phi_{i_m}, \phi_{i_{m+1}}$ - угловые положения выделенных частиц. Значение углового расстояния ϕ менялось в пределах $(0, 2\pi)$. В силу аксиальной симметрии оболочек $E(\phi;\beta) = E(\phi + n\phi^*;\beta)$, $\{n = 0, 1, 2, \ldots\}$ - периодическая функция с периодом ϕ^*. Величину углового барьера относительного поворота оболочек $U(\phi;\beta)$ будем определять как

$$U(\phi;\beta) = E(\phi;\beta) - E(\phi_0;\beta), \qquad (3.17)$$

где ϕ_0 - расстояние между выбранными частицами в конфигурации глобального минимума.

Опишем еще один независимый способ вычисления радиальных и угловых барьеров. Рассмотрим функции распределения радиальных и угловых расстояний (угловые расстояния выбираются между ближайшими частицами с *разных* оболочек)

$$f(r;\beta) = (2\pi r)^{-1}(ZN)^{-1} \int \sum_{j=1}^{N} \{\delta(|\vec{r}_j| - r)\}\, \rho(\vec{R},\vec{R};\beta)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N \qquad (3.18)$$

$$f(\phi;\beta) = (ZN_m)^{-1} \int \sum_{i_m=1}^{N_m} \delta\{(\phi_{i_m} - \phi_{i_{m+1}}) - \phi\}\, \rho(\vec{R},\vec{R};\beta)\, d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N, \quad (3.19)$$

где $m, m+1$ - номера двух последовательных оболочек, N_m - число частиц на оболочке m. Функция $f(r)$ определяет вероятность нахождения частиц на расстояниях r от центра, содержит вклад всех многочастичных эффектов взаимодействия, а также информацию о частоте перехода частиц между оболочками при радиальном плавлении. Функция распределения угловых расстояний $f(\phi)$ между частицами i_m, i_{m+1} с двух соседних оболочек характеризует вероятность относительного поворота оболочек на угол ϕ, т.е. степень ориентационной разупорядоченности кластера. Понятно, что этим функциям распределения можно поставить в соответствие некоторый эффективный потенциал W - среднее поле, в котором движется каждая отдельная частица (при радиальном плавлении) или целая оболочка (при ориентационном плавлении). Введем среднее поле W с помощью естественного для классической системы соотношения

$$
\begin{aligned}
f(y;\beta) &= \exp(-\beta\, W(y;\beta))/Z, \quad \Rightarrow \\
W(r;\beta) &= -\frac{1}{\beta}(ln\{f(r;\beta)\} - ln\{f(R_j;\beta)\}), \\
W(\phi;\beta) &= -\frac{1}{\beta}(ln\{f(\phi;\beta)\} - ln\{f(\phi_0;\beta)\})
\end{aligned}
\tag{3.20}
$$

где Z - статистическая сумма, и мы также использовали выражения (3.15), (3.17) для нормировки абсолютной величины барьеров. В такой постановке задачи радиальное и ориентационное плавление кластера происходит в момент, когда отношение высоты барьера к температуре достигает некоторго критического значения. Интересно установить на сколько это критическое значение будет меняться с размером кластера N.

Перейдем к результатам расчета барьеров. На Рис. 3.10 и 3.11 представлены радиальные и угловые барьеры для кластеров с разным числом частиц полученные из соотношений (3.15), (3.17), (3.20). Наблюдается достаточно хорошее совпадение между высотой и формой барьеров U и W. Результаты расчета барьеров W приводятся при нескольких значениях температуры ($T = 1/\beta$). Интересно отметить, что для температур ниже температуры плавления форма барьеров W почти не зависит от температуры. Значительное расхождение в высоте барьеров W и U появляется лишь при температурах в несколько раз превышающих критическую температуру плавления T_{Lind} (эта температура получена из критерия Линдемана при анализе температурной зависимости флуктуаций угловых и межчастичных расстояний (3.10, 3.11)). Это верно как при сравнении высоты радиальных, так и угловых барьеров. В случае радиальных барьеров при $T \gg T_{Lind}$, по-видимому, это связано с вкладом ангармонизмов и переходом системы в фазу сильно коррелированной жидкости, когда перескок между оболочками совершается одновременно большим числом частиц.

Наиболее интересным результатом, который следует из Рис. 3.10 (3.11) является прямая закономерность между температурой радиального (ориентационного) плавления и высотой радиального (углового) барьера. На Рис. 3.10 (3.11) приводятся критические значения температур радиального (ориентационного) плавления оболочек T^r_{Lind} (T^o_{Lind}) из критерия Линдемана. В пределах статистической погрешности произведение температуры T^r_{Lind} (T^o_{Lind}) на коэффициент 10 совпадает с высотой барьера $U(r)$ ($U(\phi)$). Это соотношение между температурой плавления и высотой барьеров подтверждается

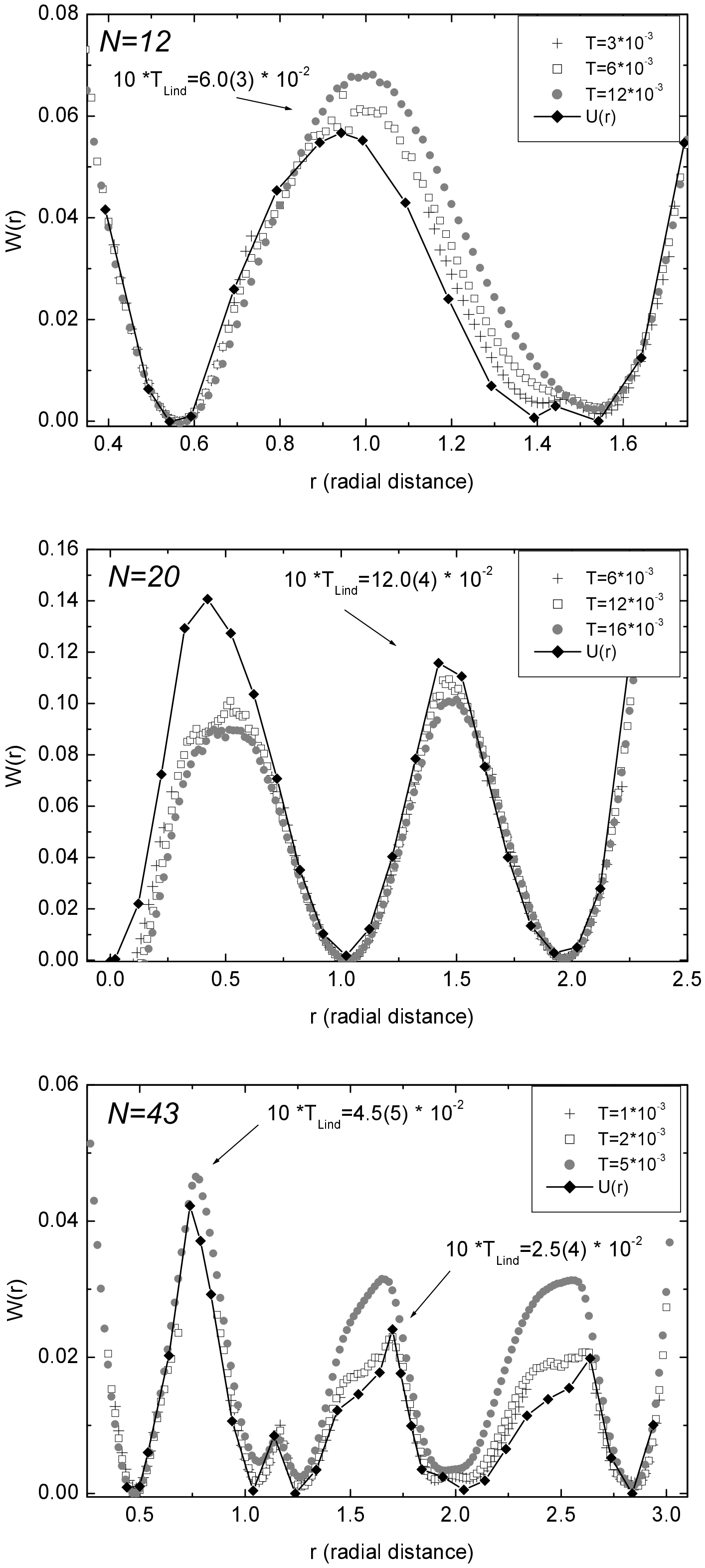


Рис. 3.10: Радиальные барьеры $W(r)$ (3.20) и $U(r)$ (3.15) для кластеров $N = 12, 20, 43$. Для кластера $N = 43$ показаны температуры плавления двух пар оболочек. Значение T_{Lind} - температура радиального плавления из критерия Линдемана.

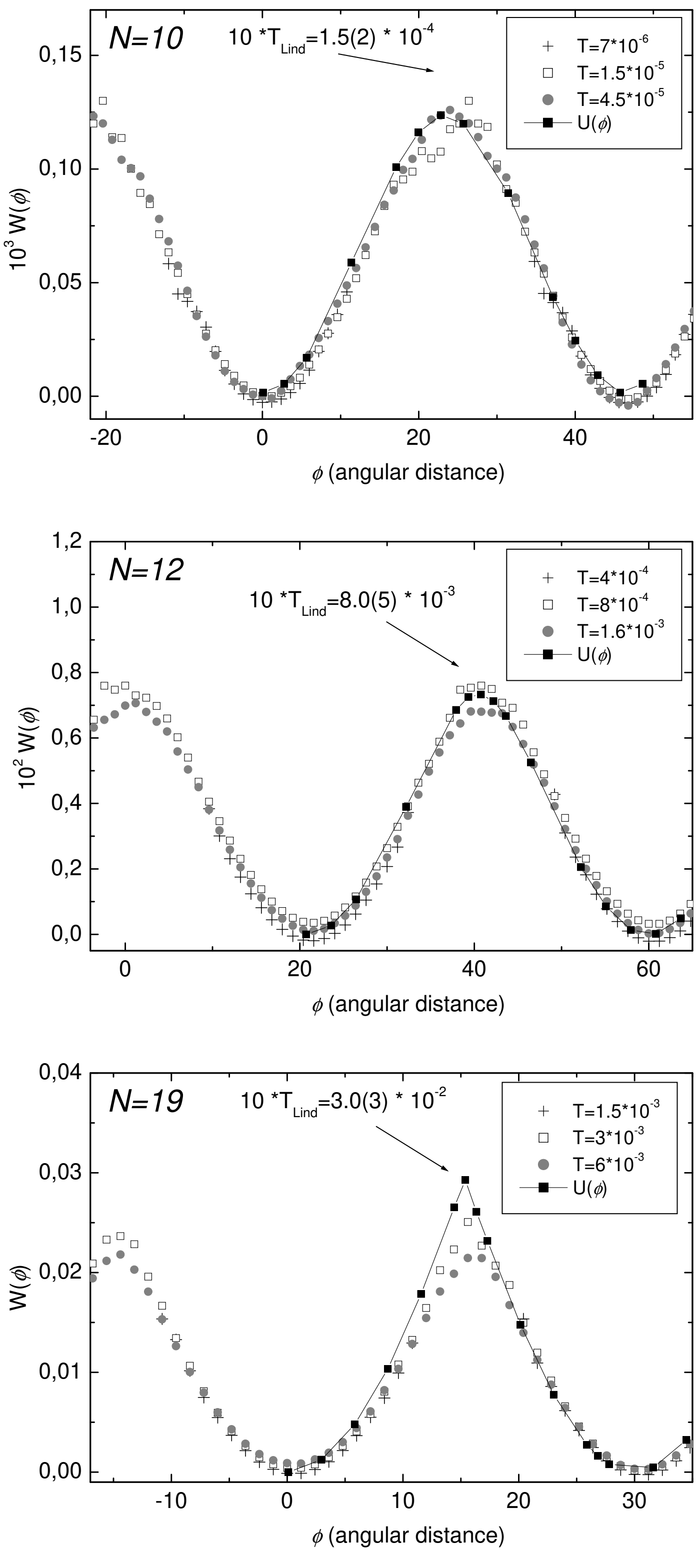


Рис. 3.11: Угловые барьеры $W(\phi)$ (3.20) и $U(\phi)$ (3.17) для кластеров $N = 10, 12, 19$. Значение T_{Lind} - температура ориентационного плавления из критерия Линдемана.

расчетами и для кластеров с другими числами N.

Обнаруженная универсальность поведения отношения T/U в критических точках позволяет утверждать, что найден *новый* критерий ориентационного и радиального плавления 2D кулоновских кластеров: *Радиальное и ориентационное плавление оболочек происходит, когда отношение температуры к высоте потенциального барьера достигает некоторого универсального значения* $\gamma = T/U(r) \approx 0.1$.

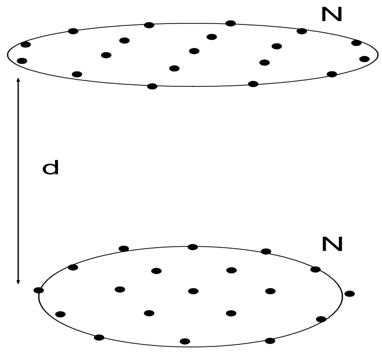
Изучение универсальности этого критерия, т.е. его применимости для описания плавления кластеров с другими типами взаимодействия представляет значительный интерес. Способы вычисления угловых и радиальных барьеров для квантовых кластеров описываются в разделе 3.3.2.

Рассмотрим теперь классическую модель с двумя взаимодействующими кулоновскими кластерами.

3.2 Электронные кластеры в системе вертикально связанных точек

3.2.1 Физическая модель

В последнее время внимание исследователей все больше стал привлекать новый класс эффективно двумерных систем, а именно, системы частиц в связанных слоях. Хотя имеется достаточное число работ по протяженным макроскопическим системам [85, 86], аналогичные конечные системы [94, 95] исследованы недостаточно подробно и, как оказывается, имеют свои интересные специфические черты по сравнению с плавлением макроскопической фазы. На свойства систем связанных точек оказывает влияние не только температура и плотность, но еще один дополнительный параметр - расстояния между слоями d. Как будут сказываться корреляции между слоями на свойства двумерных кластеров? В этом разделе мы попытаемся дать ответ на этот вопрос.



Рассмотрим систему заряженных частиц, взаимодействующих по кулоновскому потенциалу и расположенных в двух параллельных двумерных слоях, находящихся друг от друга на расстоянии d. Пусть в каждом слое имеется равное число частиц N, а их движение в слое ограничено действием аксиально симметричного гармонического потенциала. Таким образом, полная энергия системы записывается в виде

$$E = \sum_{i=1}^{2N} \frac{m_i^* \omega_0^2 r_i^2}{2} + \sum_{l=1}^{2} \sum_{i<j}^{N} \frac{e^2}{\epsilon_b |\mathbf{r}_{ij}|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{e^2}{\epsilon_b \sqrt{\mathbf{r}_{ij}^2 + d^2}}, \tag{3.21}$$

где $\mathbf{r}_{ij} \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, m^* и ϵ_b - эффективная масса частиц и диэлектрическая постоянная. После перехода в систему единиц раздела 3.1 $\{r \to r/r_0,\ E \to E/E_c,\ d \to d/r_0\}$ выражение (3.21) примет вид

$$E = \sum_{i=1}^{2N} r_i^2 + \sum_{l=1}^{2} \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{\mathbf{r}_{ij}^2 + d^2}}, \tag{3.22}$$

3.2.2 Исследование симметрии равновесных конфигураций в зависимости от расстояния между слоями

Рассмотрим случай, когда вертикально связанные точки образованы двумя кластерами $N = 19$. В предельном случае $d = 0$, пространственное положение двух параллельных слоев совпадает и в системе образуется один двумерный кластер с общим числом частиц $2N = 38$. В этом кластере один из электронов находится в центре системы, а остальные электроны распределены по тремя оболочками с числами заполнения $7, 13$ и 17. В другом пределе $d \to \infty$, система состоит из двух независимых друг от друга кластеров $N = 19$ с оболочечной структурой $\{1, 6, 12\}$. Рассмотрим теперь, что будет происходить с системой между этими двумя известными пределами.

Различные упорядоченные структуры, возникающие при $0 < d < \infty$, исследовались, во-первых, с помощью мгновенных конфигураций частиц, возникающих вдоль марковской цепи в методе Монте-Карло (эти конфигурации обеспечивают минимум энергии (3.22) или соответствуют отклонениям из этого минимума за счет тепловых флуктуаций). На Рис. 3.12 показаны равновесные положения электронов, соответствующие разным значениям расстояния d. Чтобы характеризовать симметрию конфигураций в слоях, введем параметр порядка

$$G_m(R) = \left\langle \frac{1}{N_l} \sum_{j}^{N_l} |\phi_m(j)| \right\rangle, \quad \phi_m(j) = \frac{1}{N_j(R)} \sum_{k}^{N_j(R)} e^{-im\theta_{jk}} \tag{3.23}$$

где первая сумма берется по всем частицам N_l, расположенным во внутренней области кластера (все частицы за исключением частиц на внешней оболочке), а в сумме по k участвуют только те частицы из одного слоя $N_j(R)$, которые попадают в окружность радиуса R с центром в частице с индексом j; параметр m принимает значения $m = 1, \dots, 6$; θ_{jk} - угол между некоторой фиксированной осью и вектором, соединяющим частицы j и k. Когда взаимное расположение электронов в каждом слое приближается к структуре с гексагональной симметрией, параметр порядка $G_6 \to 1$, это соответствует конфигурации, когда каждый электрон имеет в среднем по 6 соседей. Для конфигураций с квадратной или ромбической симметрией, где среднее число соседей равно четырем, $G_4 \to 1$. Из поведения параметра порядка на Рис. 3.12 видно, что гексагональная симметрия преобладает при $d \geq 1.1$, а ромбическая и прямоугольная при $d \leq 0.8$, причем в интервале расстояний $0.5 \leq d \leq 0.8$ часть электронов имеет по 5 и 6 соседей (соответствующие параметры порядка $G_m(R) \leq 0.5$).

Понятно, что изменение симметрии конфигураций должно найти отражение в поведении радиальных $f(r)$ и парных корреляционных функций $f(r_{ij})$, показанных на Рис. 3.13. При $d = 0.9$ и $d = 1.1$ в расположении частиц преобладает угловая симметрия, а радиальная функция распределения на Рис. 3.13 имеет серию ярко выраженных максимумов на расстояниях, соответствующих оболочкам двумерных кластеров $N = 19$. При $d > 0.9$ кластеры в разных слоях слабо связаны и равновесные конфигурации в каждом слое совпадают с конфигурациями невзаимодействующих двумерных кластеров $N = 19$ (две оболочки и одна частица в центре). Парная функция распределения для электронов из разных слоев $f(r_{ij})_{12}$ показывает, что наиболее выгодно такое взаимное расположение кластеров, при котором их центральные оси симметрии совпадают, однако как целое они повернуты относительно друг друга на некоторый угол - электроны внешней и внутренней оболочек занимают наиболее энергетически выгодное положение, при котором среднее межчастичное расстояние между электронами из разных слоев $\bar{r}_{ij} \approx 0.5$. Это расстояние увеличивается с уменьшением параметра d и стремится к значению $\bar{r}_{ij} \to 1$ уже при $d = 0.3$, т.е. при этих характерных расстояниях кулоновское взаимодействие между частицами из одного слоя и частицами из разных слоев становится одного порядка и система уже не так “чувствует” свое третье измерение. Интересно, что при $d \leq 0.3$ четыре максимума функции распределения уже соответствуют радиусам четырех оболочек в изолированном двумерном кластере $2N = 38\{1, 7, 13, 17\}$.

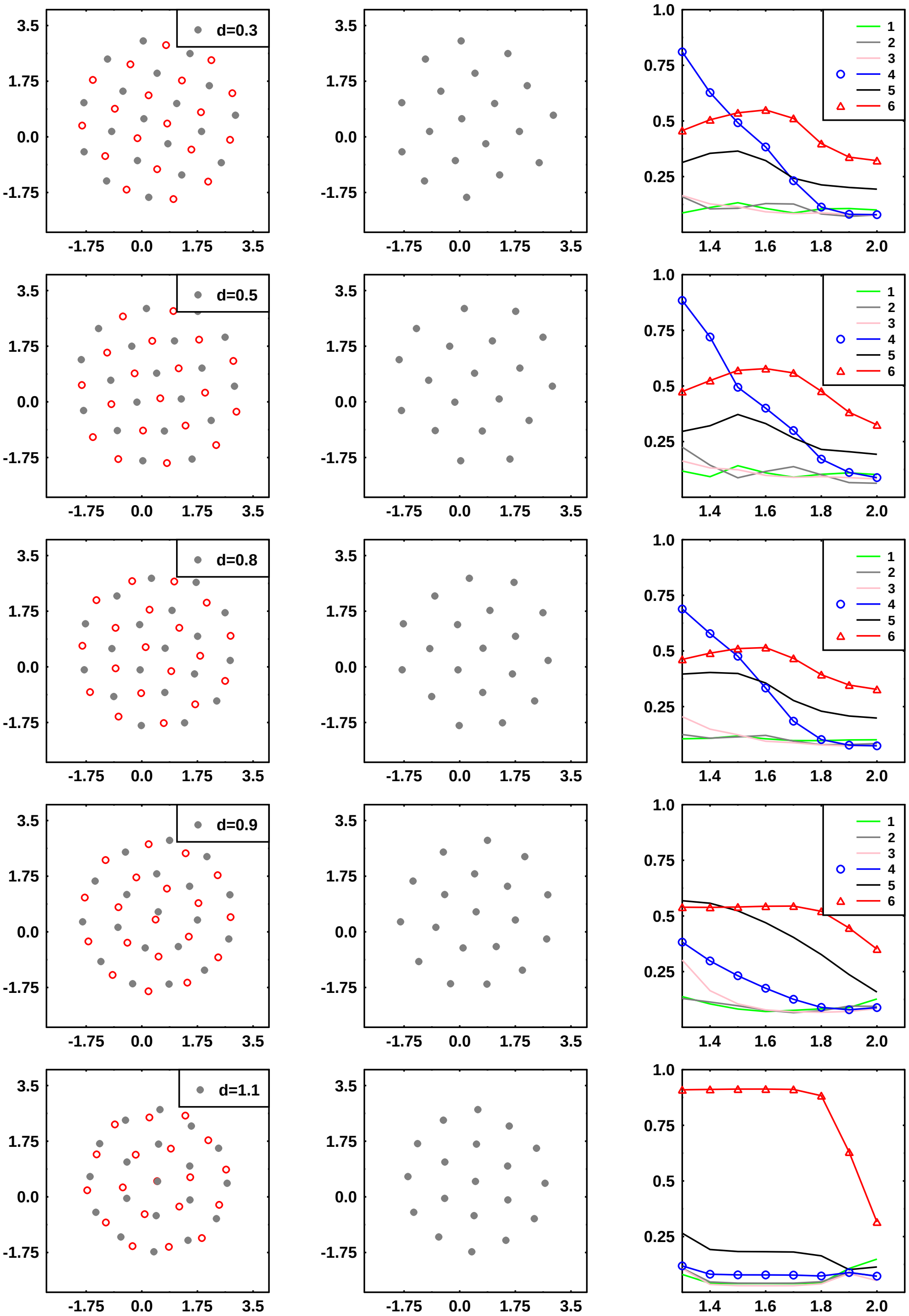


Рис. 3.12: Равновесные конфигурации в вертикально связанных точках с числом частиц $2N = 38$ в зависимости от расстояния между точками d. (1) Конфигурации частиц из разных слоев (заполненные и незаполненные символы) спроектированные на одну плоскость; (2) типичные конфигурации частиц в каждом слое; (3) параметр порядка $G_m(R)$, характеризующий угловую симметрию: $m = 1, 2, 3$ (прерывистые линии), $m = 4$ (круги), $m = 5$ (сплошная линия), $m = 6$ (треугольники). Температура $T = 1.0 \times 10^{-3}$.

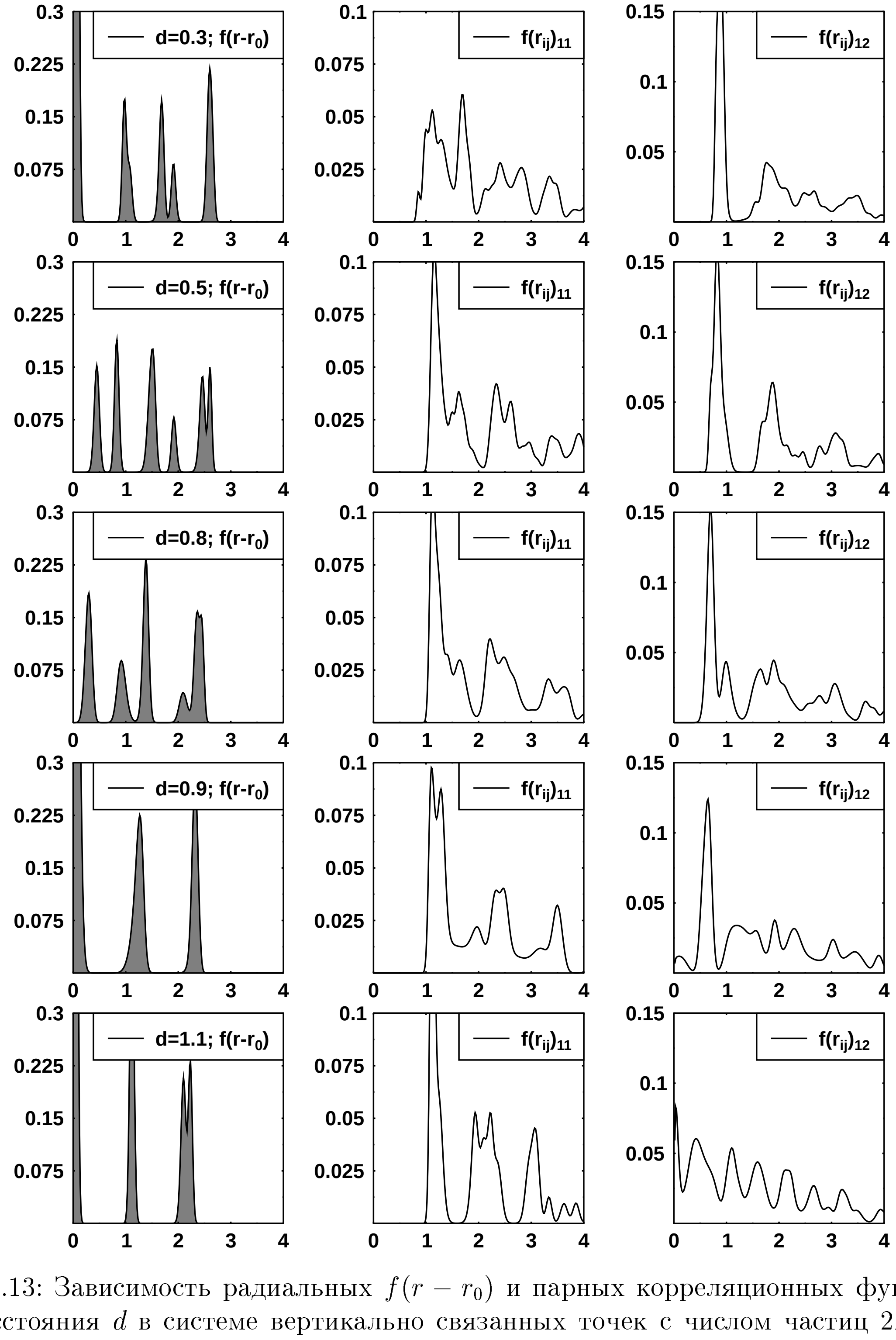


Рис. 3.13: Зависимость радиальных $f(r-r_0)$ и парных корреляционных функций $f(r_{ij})$ от расстояния d в системе вертикально связанных точек с числом частиц $2N = 38$; (1) радиальная функция $f(r-r_0)$ в каждом слое; (2) парная функция $f(r_{ij})_{11}$ в каждом слое; (3) парная функция $f(r_{ij})_{12}$ между частицами из разных слоев. Температура $T = 1.0\times10^{-3}$.

Влияние корреляций между слоями проявляет себя также в зависимости внутренней энергии системы от расстояния между слоями (см. Рис. 3.14). Из

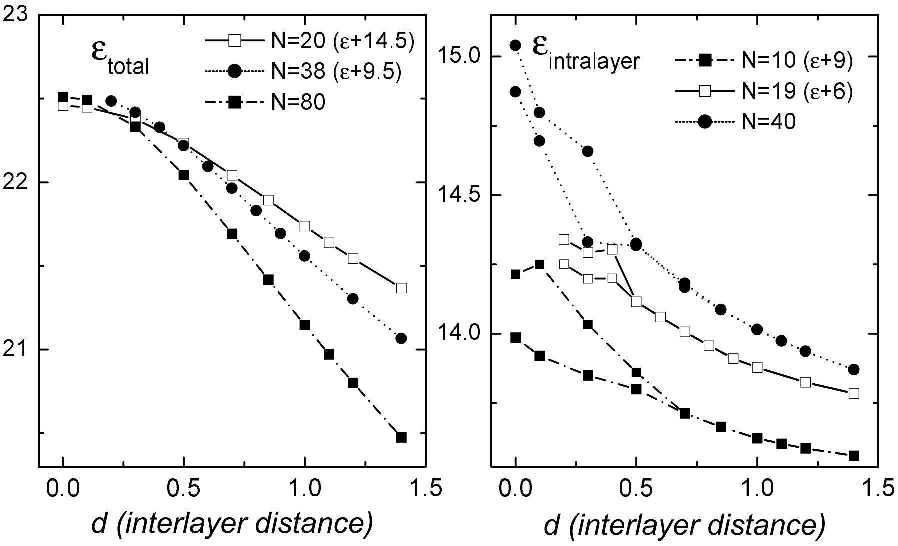


Рис. 3.14: Удельная полная внутренняя энергия $\varepsilon_{total} = E/2N$ и удельная внутренняя энергия $\varepsilon_{intralayer} = E^i/N$ в слое $i = 1, 2$ в зависимости от d и чисел частиц $2N = 20, 38, 80$. Для удобства сравнения разных зависимостей для $N < 40$ мы сдвинули начальный отсчет удельной энергии на некоторую константу: $\varepsilon + const$. Температура $T = 1 \times 10^{-3}$.

Рис. 3.14 видно во-первых, что с увеличением размера системы $N = 20 \to 80$ удельная энергии $\varepsilon_{total} = E/2N$ больших кластеров убывает с расстоянием d быстрее, чем в малых кластерах. Во-вторых, в конечных системах энергия ε_{total} как функция расстояния d не обнаруживает особенностей, характерных для фазового перехода первого рода, который сопровождает изменение симметрии у конфигураций основного состояния в макроскопических системах [85]. Это объясняется тем, что в конечных системах переход между конфигурациям на Рис. 3.12 происходит непрерывным образом, т.е. непрерывным образом меняются все межчастичные и угловые расстояния. В третьих, интересно отметить появление значительных флуктуаций удельных энергий каждого слоя $\varepsilon_{intralayer}$ при $d < 0.5$, где значения удельных энергий разных слоев не совпадают между собой (см. Рис. 3.14). Наибольшие флуктуации, как показывают расчеты, наблюдаются в небольших кластерах, $N < 20$. Несовпадение энергий происходит приблизительно в тот же момент, когда в расположении электронов полностью теряется аксиальная симметричность, характерная для оболочечной структуры, и система начинает напоминать вложенные друг в друга части идеальной ромбической решетки - структурную фазу, наблюдавшуюся при этих расстояниях d в макроскопических системах [85].

3.2.3 Плавление и фазовая диаграмма

Как было показано ранее, в двумерных кластерах с повышением температуры происходит два типа разупорядочения - ориентационное и радиальное плавление. Система из двух взаимодействующих кластеров и наличие дополнительного параметра - межслоевого расстояния d, вместе с которым меняется симметрия равновесных конфигураций, требует более детального изучения процесса плавления и влияния d на температуру плавления.

Плавление в системе вертикально связанных точек исследовалось с помощью критерия Линдемана, т.е. анализировалась температурная зависимость флуктуаций радиальных и межчастичных расстояний. Величина флуктуаций вычислялась для каждого слоя по отдельности, а также между частицами из разных слоев. Введем по определению, флуктуации расстояний u^{lm} между разными слоями $[l \neq m,\ C = N_l N_m]$, внутри одного слоя $[l = m$ и $i \neq j$, $C = N_l(N_l - 1)]$, и радиальные флуктуации относительно центра ловушки u^l, как

$$u^{lm} \equiv \frac{1}{C}\sum_{i}^{N_l}\sum_{j}^{N_m}\sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2\rangle}{\langle r_{ij}\rangle^2} - 1}, \qquad u^l \equiv \frac{1}{N_l}\sum_{i}^{N_l}\sqrt{\frac{\langle r_i^2\rangle}{\langle r_i\rangle^2} - 1}, \tag{3.24}$$

где N_l и N_m - число частиц соответственно в слоях l и m; r_{ij} - проекция межчастичного расстояния в одну плоскость; $\langle \ldots \rangle$ - термодинамическое среднее.

В ходе расчетов нами было обнаружено, что вблизи точек ориентационного и радиального плавления величина флуктуаций (3.24) возрастает в несколько раз (см. Рис. 3.15(a),(b)).

Начнем уменьшать расстояние между слоями с предельного случая $d \to \infty$. Конфигурация частиц $N = 19\{1, 6, 12\}$, которая соответствует основному состоянию двух независимых кластеров, не меняется вплоть до $d \approx 0.9$. Температурная зависимость парных двухчастичных флуктуаций расстояний для частиц из одного и разных слоев $u^{lm}(u^l)$ (3.11), для расстояния $d = 1.4$, показана на Рис. 3.15(a). Два скачка в значениях флуктуаций соответствуют двум фазовым переходам. Сначала, одновременно в двух слоях происходит ориентационное плавление, при этом оболочки с числами заполнения 6 и 12 теряют свой относительный ориентационный порядок. Это плавление происходит при температуре $T_o \approx 2.5 \times 10^{-3}$. Эта температура лишь немного ниже значения $T_o \approx 3 \times 10^{-3}$ - температуры плавления однослойной системы с

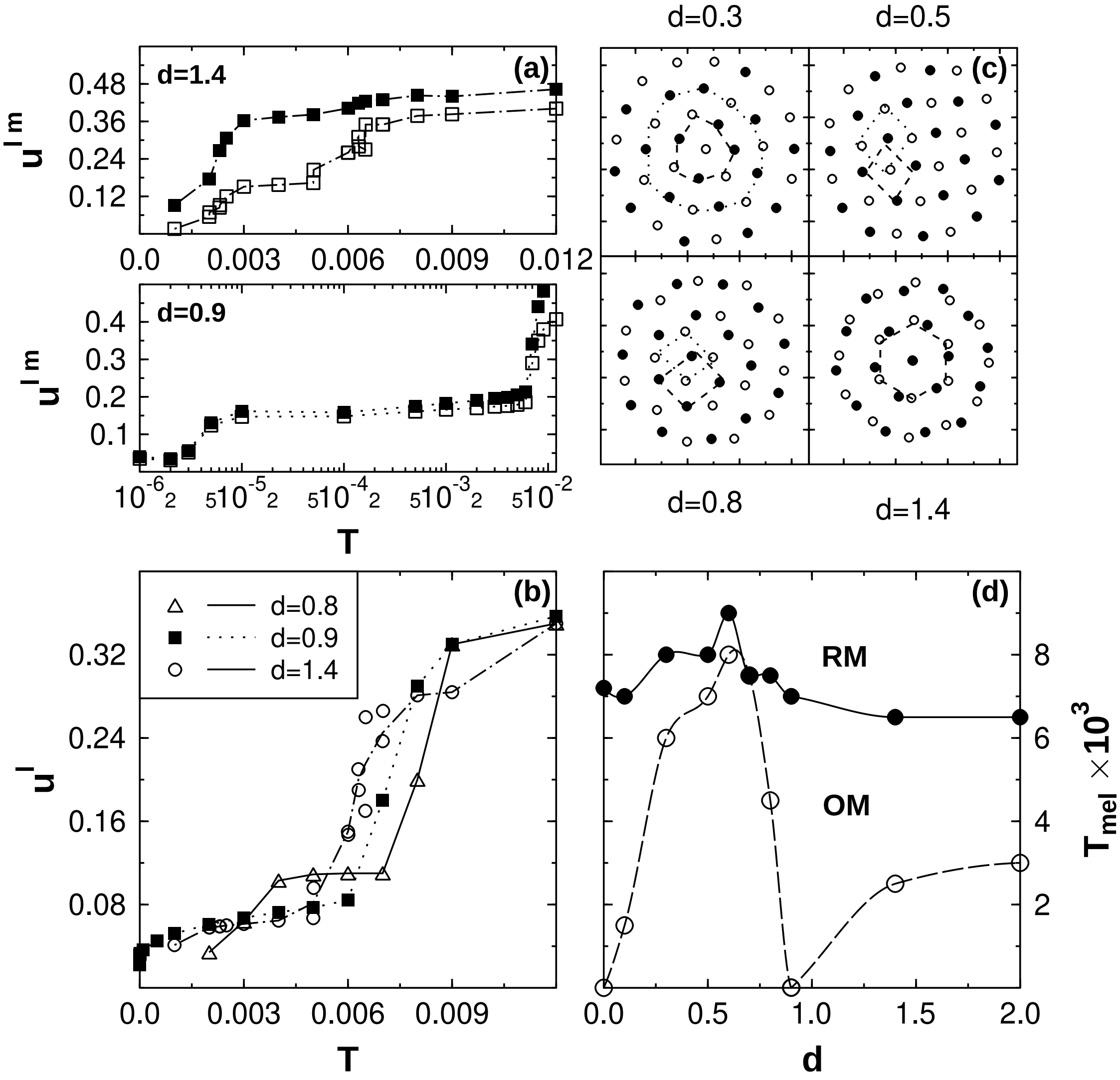


Рис. 3.15: Плавление “кристаллической” фазы в вертикально связанных точках. (a) Относительные двухчастичные флуктуации расстояний u^{lm} для частиц из одного слоя (незаполненные символы) и из разных слоев (заполненные символы); (b) поведение радиальных флуктуаций u^l вблизи точки плавления; (c) равновесные конфигурации электронов в зависимости от параметра d (пунктир показывает симметрию конфигураций); (d) зависимость температуры плавления радиально (RM) и ориентационно (OM) упорядоченной фазы от расстояния между слоями d.

$N = 19$. Из Рис. 3.15(а) видно, что величина флуктуаций между частицами из разных слоев превосходит аналогичную величину флуктуаций между частицами из одного слоя. Такое поведение флуктуаций объясняется тем, что при расстоянии $d = 1.4$ разрушение корреляций между слоями происходит при некоторой температуре, которая даже ниже температуры ориентационного плавления оболочек. Потеря корреляций проявляет себя в том, что вращение оболочек в двух слоях происходит независимо друг от друга. Радиальное плавление наступает при более высокой температуре, $T_r \approx 6.5 \times 10^{-3}$, которая совпадает с температурой плавления отдельного кластера $N = 19$.

С дальнейшим уменьшением расстояния до $d = 0.9$ происходит изменение чисел заполнения оболочек $\{1, 6, 12\} \to \{1, 7, 11\}$. Новая конфигурация $\{1, 7, 11\}$ (см. Рис. 3.12) оказывается энергетически более выгодной. Из-за увеличения кулоновского взаимодействия между слоями при уменьшении d относительное вращение двух внешних оболочек в разных слоях "замораживается", однако как целое они могут вращаться относительно также "замороженных" внутренних оболочек. Это факт подтверждается поведением флуктуаций на Рис. 3.15(а) ($d = 0.9$), где в отличии от случая $d = 1.4$ значение межчастичных флуктуаций внутри одного слоя и между слоями совпадают. Критическая температура этого фазового перехода, $T_o \approx 5 \times 10^{-6}$, оказывается значительно меньше температуры радиального плавления, $T_r \approx 7 \times 10^{-3}$. Уменьшение температуры ориентационного плавления на несколько порядков объясняется потерей "магичности", которая для кластера $N = 19$ заключалась в гексагональной симметрии старой конфигурации $\{1, 6, 12\}$.

При расстоянии между слоями $d = 0.8$, рост межслоевых корреляций приводит к образованию во внутренней части кластеров "объемной" фазы - вложенных друг в друга частей ромбической решетки (см. Рис. 3.12). Как оказывается, эта внутренняя часть системы может терять ориентационный порядок относительно "замороженных" внешних оболочек. Это происходит при температуре $T_o \approx 4.5 \times 10^{-3}$. Такое существенное увеличение температуры ориентационного плавления, по сравнению со случаем $d = 0.9$, происходит за счет того, что внутренние и внешние оболочки теряют угловую симметрию относительно центра системы (в наибольшей степени это проявляется при $d = 0.5$, Рис. 3.12). Как показывает анализ, теперь часть частиц занимает некоторое промежуточное положение между внутренней и внешней оболочками, а это препятствует возможности их взаимного вращения. Радиальные функции распределения на Рис. 3.12 также подтверждают это наблюдение: между максимумами распределения двух оболочек при $d \geq 0.9$ появляются дополнительные пики. Интересно, что при расстоянии $d = 0.8$ происходит стабилизация кластеров относительно радиального плавления - температура плавления возрастает до значения $T_r \approx 7.5 \times 10^{-3}$.

При значениях $d = 0.5 \ldots 0.7$ в системе практически полностью пропадает угловая симметрия и в каждом слое образуется часть ромбической решетки. Данное обстоятельство отражается на поведении флуктуаций. Теперь, ориентационное и радиальное плавление происходит приблизительно при одинаковой температуре, $T_o \approx 7 \ldots 8 \times 10^{-3}$ и $T_r \approx 7.5 \ldots 9 \times 10^{-3}$ (см. Рис. 3.15(d)). Уменьшение расстояния до значения $d = 0.3$ приводит к еще одному изменению симметрии конфигураций и к формированию в каждом слое фазы, напоминающей прямоугольную решетку (см. Рис. 3.12). Тем не менее, как целое система начинает постепенно восстанавливать аксиальную симметрию, и как видно из Рис. 3.15(c) в проекции частиц на одну плоскость образуется почти аксиально симметричный кластер $2N = 38$ с оболочечной структурой $\{1, 7, 13, 17\}$. Восстановление угловой симметрии ведет к значительному падению температуры ориентационного плавления при $d = 0.3$ (см. Рис. 3.15(d)). Очевидно, что при этих расстояниях межслоевые корреляции начинают играть в свойствах системы определяющую роль и она эффективно становится двумерной. В предельном случае $d \to 0$, снова наблюдаются все свойства двумерного кластера $2N = 38$, включая критические температуры ориентационного и радиального плавления, $T_o \approx 1 \times 10^{-6}$ и $T_r \approx 7.2 \times 10^{-3}$.

Обобщение результатов моделирования “кристаллизации” в связанных точках представлено на фазовой диаграмме на Рис. 3.15(d), где показана зависимость температур плавления то расстояния между слоями d. Температуры радиального и ориентационного плавления оказываются немонотонными функциями. Их рост происходит в области, когда оболочечная симметрия переходит в ромбическую. Наибольшая устойчивость к плавлению наблюдается при $d \approx 0.6$, где значение температуры плавления возрастает примерно на 50% (по сравнению с температурой плавления однослойной системы), а ориентационное и радиальное плавление происходят почти одновременно. Эту тенденцию к стабилизации можно проследить на Рис. 3.15(b), где с уменьшением d скачок радиальных флуктуаций сдвигается в область более высоких температур. Таким образом, дополнительная стабилизация системы связанных точек имеет место в интервале расстояний $0.3 \leq d \leq 0.7$, что подтверждают аналогичные наблюдения в макроскопических системах [85].

Следует отметить, что рассмотренные фазовые переходы в классических системах, как показывает расчет, вполне определены и в квантовом режиме.

Мы ожидаем, что аналогичная тенденция к стабилизации будет наблюдаться и в квантовых мезоскопических системах (для макроскопических систем при $T = 0$ это было показано в работе [86]): значение критического безразмерного параметра r_s[1], при котором наблюдалось плавление квантовых кластеров [103], будет уменьшаться, $r_s \to 2/3 r_s$. Это, в свою очередь, будет способствовать возможности экспериментального наблюдения кристаллизации в электронных [дырочных] системах в гетероструктурах даже в нулевом магнитном поле. Перейдем к изучению кластеров в квантовом режиме.

3.3 Квантовые 2D кластеры

За последнее время значительно возросло число работ посвященных экспериментальному и теоретическому исследованию двумерных (2D) электронных систем в квантовых точках. Эти "искусственные" атомы обладают интересными оптическими свойствами и достаточно перспективны для применения в микроэлектронике [96]. "Искусственные" атомы важны также и для изучения роли корреляционных эффектов в вырожденных системах. Их главное преимущество в том, что параметр электрон-электронного взаимодействия легко контролировать с помощью внешних параметров, таких как размер квантовой точки, ее формы и числа электронов в системе.

В большинстве предыдущих работ по конечным квантовым системам рассматривался либо случай малого числа частиц, где возможно точное решение квантовомеханической задачи, либо, если число электронов $N > 9$, кулоновское взаимодействие учитывалось с помощью различных приближений. Предельный случай поведения конечных систем при *нулевой температуре* исследовался, например, в приближении Хартри-Фока [97], где был обнаружен фазовый переход ($r_s \approx 1.4$) из Ферми жидкости в частично упорядоченную фазу, которая получила название "вигнеровская молекула". Аналогичный переход, но при конечных температурах, был изучен с помощью метода квантового Монте-Карло [98], здесь режим кроссовера был обнаружен при ($r_s \approx 4$). "Молекулярная" фаза характеризуется доминирующей ролью кулоновских корреляций над спиновыми эффектами, которые однако начинают играют определяющую роль в области кроссовера и в жидкой фазе. Можно ожидать, что дальнейшее увеличение корреляций в квантовых точках (увеличение параметра r_s) приведет к пространственно упорядоченной

[1]Этот параметр определяется как отношение ($r_s = \bar{r}/a_B^*$) среднего межчастичного расстояния к эффективному боровскому радиусу.

фазе, которая напоминает вигнеровский кристалл. Будем называть эту фазу квантовым кластером.

Ниже подробно обсуждается влияние квантовых эффектов на свойства кластеров. В отличии от классических систем электроны больше не рассматриваются как точечные частицы, а характеризуются волновыми функциями конечной полуширины, которые могут иметь сильную анизотропию. Теперь при достаточно низких температурах, термодинамическое состояние системы начинает зависеть от дополнительного параметра, характеризующего меру квантовости системы, т.е. от отношения характерного размера электронной волновой функции к среднему межчастичному расстоянию.

3.3.1 Физическая модель

Теоретическое исследование систем электронов при конечных температурах требует одновременного учета, как сильных корреляций за счет кулоновского отталкивания, так эффектов квантовой статистики. Из-за доминирующей роли в кристаллической фазе межчастичных взаимодействий, применение методов теории возмущения и среднего поля не дает достаточно достоверных результатов. С другой стороны применение квантового метода Монте-Карло раздела 1.2 оказывается достаточно эффективным при средней степени вырождения электронной системы, что характерно для кристаллической фазы (низкотемпературный предел, $T \to 0$, существования макроскопического кристалла в 3D ($r_s \geq 160$) [99], а в 2D ($r_s \geq 37$) [100]).

Рассмотрим двумерную (2D) систему N электронов при температуре T. Электроны отталкиваются по кулоновскому закону и удерживаются гармоническим потенциалом с частотой ω_0. Будем рассматривать неполяризованный случай [2], когда суммарный спин системы $S = 0$ (или $S = 1/2$). Гамильтониан системы записывается в виде

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_i^*} + \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i^* \omega_0^2 r_i^2}{2} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{\epsilon_b |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \tag{3.25}$$

Используя масштабные преобразования $\{r \to r/r_0,\ E \to E/E_c\}$ выраже-

[2] Т.е. в системе имеется четное (нечетное) число электронов, половина из которых имеет противоположное направление спина. В поляризованном случае суммарный спин $S = N/2$.

ние (3.25) преобразуется к виду

$$\hat{H} \;=\; -\frac{n^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N} r_i^2 + \sum_{i<j}^{N}\frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \qquad (3.26)$$

где $n \equiv \sqrt{2}\, l_0^2/r_0^2 = (a_B^*/r_0)^{1/2}$ - параметр квантовых флуктуаций, a_B^* - эффективный боровский радиус, $l_0^2 = \hbar/(m^*\omega_0)$ - параметр волновой функции основного состояния электрона в гармоническом потенциале. Далее по аналогии с протяженными системами, введем определение параметра $r_s \equiv r_0/a_B^* = 1/n^2$ (отметим, что в мезоскопических кластерах r_s характеризует только среднюю электронную плотность). Введем, как и в классическом случае, безразмерную температуру $T \equiv k_B T/E_c$ и $\Gamma \equiv 1/T$. Таким образом, как следует из (3.26) термодинамические свойства полностью определяются тремя параметрами $\{n, T, N\}$.

С помощью гамильтониана (3.26) и метода квантового Монте-Карло были изучены равновесные конфигурации электронов в квантовых точках. Вычисления проводились в широком диапазоне параметров $\{n, T, N\}$. Для каждого набора параметров проводилось несколько независимых расчетов. Как и в случае классических кластеров было обнаружено, что электроны в квантовых точках формируют оболочечные структуры, которые однако постепенно исчезают при увеличении параметра квантовых флуктуаций n. Анализ конфигураций электронов показывает, что числа заполнения оболочек в квантовых кластерах остаются такими же, как и в классическом пределе $n \to 0$. В ходе расчетов было обнаружено, что в квантовых кластерах плавление тоже происходит в две стадии - ориентационного и радиального разупорядочения оболочек, однако квантовые флуктуации существенно понижают критические значения температур плавления. Перейдем к более подробному исследованию роли квантовых флуктуаций.

3.3.2 Равновесная термодинамика. Специфика квантового ориентационного и радиального плавления

Рассмотрим кластер с $N = 12$ электронами. На Рис. 3.16 показаны равновесные конфигурации частиц при достаточно низкой температуре и трех значениях параметра флуктуаций n, которые увеличиваются от (a) к (c), причем (b) соответствует значению флуктуаций в критической точке, когда имеет место ориентационное плавление оболочек. Из Рис. 3.16 видно, что квантовое плавление характеризуется достаточно сильной анизотропией волновых функций электронов[3]. Волновые функции вытянуты вдоль глубоких и достаточно узких потенциальных долин, которые формируются за счет суперпозиции сильного кулоновского отталкивания и потенциала гармонической ловушки.

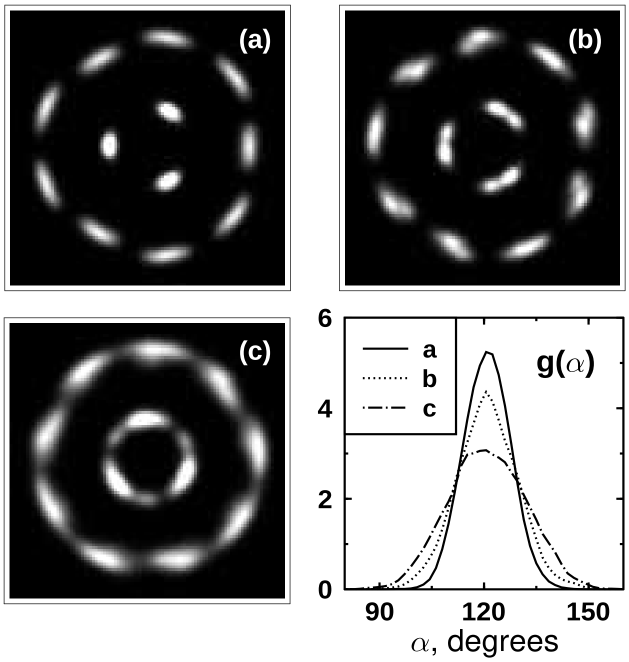


Рис. 3.16: Мгновенные конфигурации электронной плотности кластера $N = 12$. a) До ориентационного плавления оболочек ($n = 0.01$); b) в точке ориентационного плавления ($n = 0.014$); c) в фазе “жидкого” кристалла с радиально упорядоченными и ориентационно разупорядоченными оболочками ($n = 0.02$). Внизу справа показана корреляционная функция $g(\alpha)$ угловых расстояний внутренних электронов. Температура $T = 1.0 \times 10^{-4}$.

Рост квантовых флуктуаций от (a) к (c) происходит, главным образом, в угловом направлении, а радиальная составляющая флуктуаций почти не меняется. Более подробный анализ Рис. 3.16(b) показывает, что при критическом значении флуктуаций, плотность вероятности электронов на внутренней оболочке имеет два максимума. Эти максимумы соответствуют наиболее вероятному пребыванию электронов в одном из двух пространственно близких

[3]Показано распределение траекторий квантовой системы во мнимом времени (см. раздел 1.2) вычисленное вдоль марковской цепи. Начало и конец траекторий фиксировались вблизи равновесных положений электронов. В пределе $T \to 0$ можно показать, что вычисленное распределение пропорционально квадрату многочастичной волной функции $|\Psi(R)|^2$, если каждый из электронов локализован вблизи некоторого потенциального минимума.

минимумов потенциальной энергии. Эти минимумы соответствуют конфигурациям симметричным по отношению к центральной оси симметрии кластера, т.е. симметричным по отношению к повороту внутренней оболочки на некоторый угол. Увеличение флуктуаций на Рис. 3.16(c) приводит к дальнейшему расплыванию волновых функций и к появлению трех максимумов у функции распределения внутренних электронов. Понятно, что ориентационное плавление сопровождается ростом угловых флуктуаций. Рост угловых флуктуаций можно проследить с помощью парных корреляционных функций угловых расстояний на Рис. 3.16(d). Увеличение характерного размера волновых функций или флуктуаций, приводит также к постепенному уменьшению высоты эффективного классического потенциального барьера $W(\phi, n)$ для взаимного проворота оболочек на некоторый угол (см. Рис. 3.17). Метод вычисления эффективного барьера приводится ниже. Как и в классическом случае, высота этого барьера по порядку величины должна совпадать с температурой ориентационного плавления. По этой причине, уменьшение высоты барьера с ростом квантовых флуктуаций влечет за собой уменьшение температуры плавления. В предельном случае $T \to 0$, "холодное" ориентационное плавление происходит при некотором критическом значении энергии нулевых колебаний, а высота эффективного классического барьера $W^{max}(\phi, n) \to 0$.

По аналогичной причине при $T \to 0$, в квантовых кластерах происходит "холодное" радиальное плавление. Уширение волновых функций за счет роста квантовых флуктуаций приводит к уменьшению высоты эффективного классического барьера для перескока электронов на соседние оболочки $W(r, n)$ (см. Рис. 3.18).

На Рис. 3.17 и 3.18 показана зависимость угловых и радиальных эффективных барьеров от силы флуктуаций n для кластеров $N = 12$ и $N = 19$. Интересно, что при рассмотренных достаточно низких температурах $T \ll 1$, плавление кластеров происходит при совпадающих в пределах статистической погрешности критических значениях $W^{max}/T \approx 1.5 \ldots 1.6$. Как показывает анализ, это отношение высоты эффективного углового (радиального) барьера к температуре уменьшается вдоль всей границы ориентационно (радиально) упорядоченной фазы кластеров от значения $U^{cl}(R)/T = 10$ в классическом пределе до значения $W^{max}/T \approx 1.5 \ldots 1.6$ вблизи точки "холодного" плавления.

Опишем теперь метод вычисления эффективных классических барьеров в квантовых системах. Представим статистическую сумму в виде функцио-

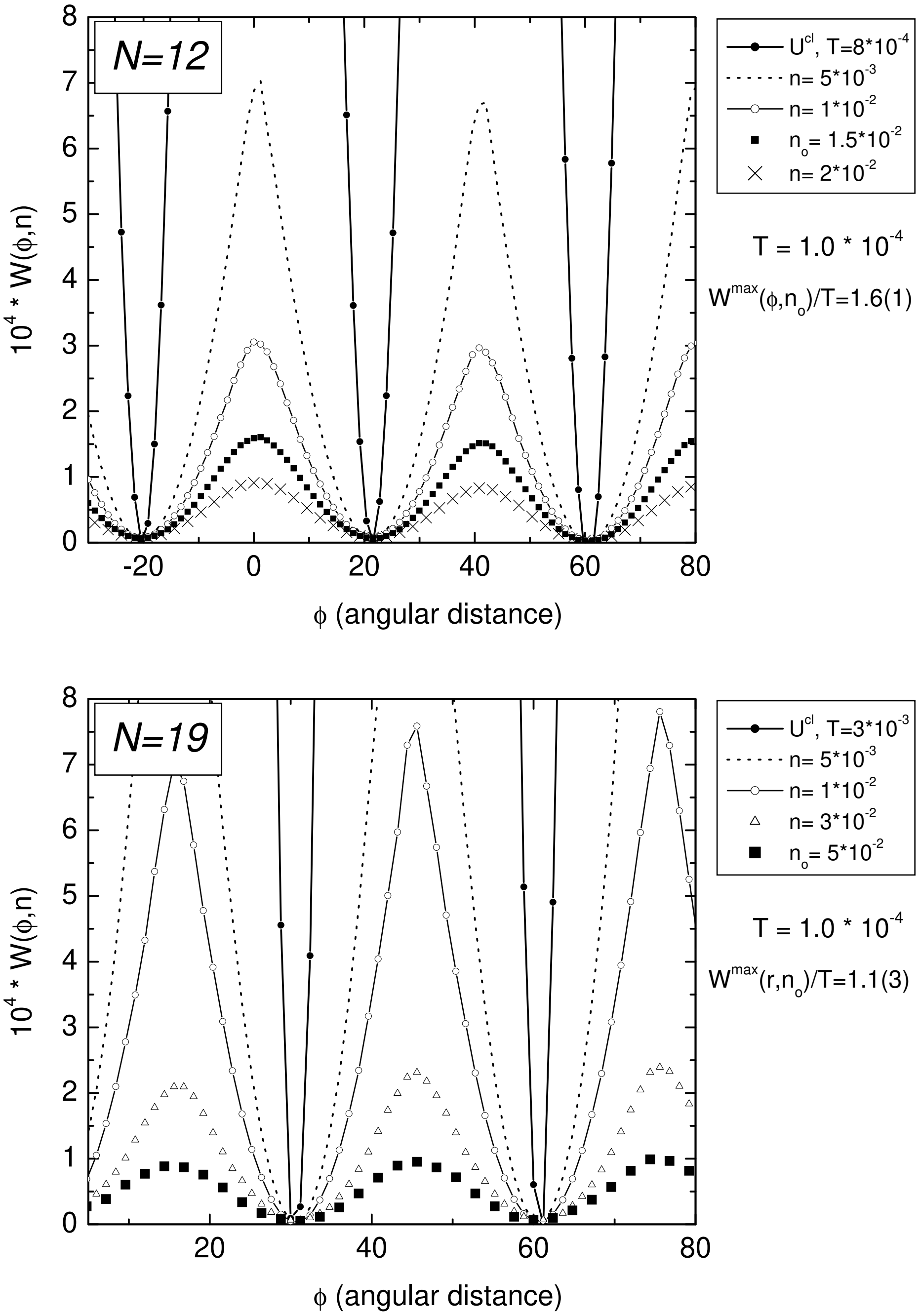
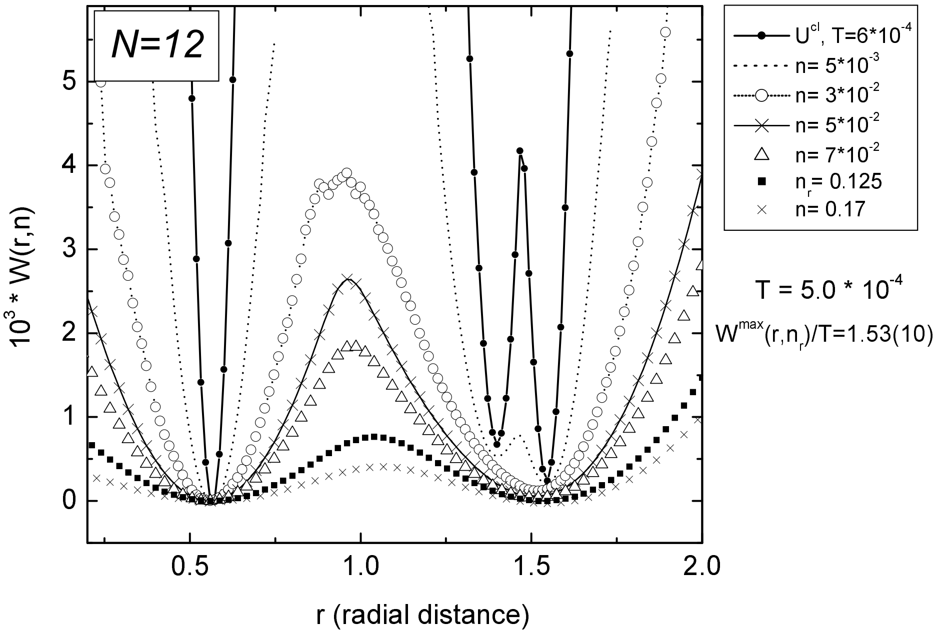


Рис. 3.17: Зависимость эффективного классического углового барьера $W(\phi, n)$ кластеров $N = 12, 19$ от параметра квантовых флуктуаций $5\times10^{-3} < n < 0.05$. Критическое значение n_o соответствует началу ориентационного плавления. U^{cl} - угловой барьер в классическом пределе (см. раздел 3.1.3). В критической точке приведено отношение максимальной высоты эффективного барьера к температуре, $W^{max}(\phi, n_o)/T$.



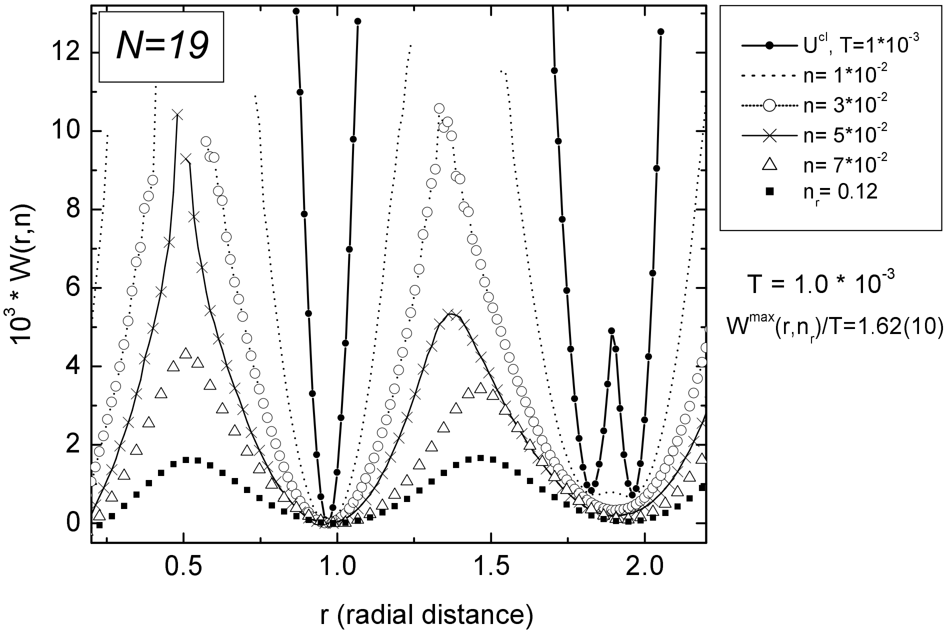


Рис. 3.18: Зависимость эффективного классического радиального барьера $W(r, n)$ кластеров $N = 12, 19$ от параметра квантовых флуктуаций $5 \times 10^{-3} < n < 0.17$. Критическое значение n_r соответствует началу радиального плавления. U^{cl} - радиальный барьер в классическом пределе (см. раздел 3.1.3). В критической точке приведено отношение максимальной высоты эффективного барьера к температуре, $W^{max}(r, n_r)/T$.

нального интеграла по траекториям [101]

$$Z \equiv e^{-\beta F} = \int D(x(\tau))\, exp\left[-\int\limits_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2}\dot{x}^2 + V(x(\tau))\right]\right], \qquad (3.27)$$

где $\int D(x(\tau))$ - интегрирование по всем замкнутым траекториям $x(\tau) : x(0) = x(\beta)$. После фурье-представления замкнутых траекторий в виде

$$x(\tau) = x_0 + \sum_{n=1}^{\infty} x_n\, sin(\omega_n \tau), \quad \omega_n = \pi n/\beta$$

выражение (3.27) можно записать как

$$Z = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{\pi/(\beta\omega_n^2)}}\, exp\left[-\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 |x_n|^2 - \int_0^\beta d\tau V(x(\tau))\right]. \quad (3.28)$$

Если вычислить все интегралы по dx_n, выражение для статистической суммы примет вид классического конфигурационного интеграла с потенциалом $W(x_0)$

$$Z = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}}\, e^{-\beta W(x_0)}, \qquad (3.29)$$

где

$$W(x_0) = -\frac{1}{\beta} ln \left(\prod_{n=1}^{\infty} \frac{dx_n}{\sqrt{\pi/(\beta\omega_n^2)}}\, exp\left[-\beta \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n^2 |x_n|^2 - \int_0^\beta d\tau V(x(\tau))\right]\right) \qquad (3.30)$$

В высокотемпературном пределе, траектории сильно отличающиеся от центральной траектории x_0, дают незначительный вклад в статистическую сумму из-за сильного экспоненциального затухания кинетического члена $\omega_n^2 |x_n|^2$, и при $T \to \infty$ имеет место известный классический предел

$$Z \to Z_{cl} = \int \frac{dx_0}{\sqrt{2\pi\beta}}\, e^{-\beta V(x_0)}, \quad W(x_0) \to V(x_0). \qquad (3.31)$$

Принимая во внимание этот предельный случай, будем рассматривать функцию $W(x_0)$ как некоторый эффективный классический потенциал, который соответствует *квантовой* статистической сумме Z.

Используем эффективный классический потенциал $W(x_0)$, чтобы ввести определение *радиальных и угловых барьеров в 2D квантовых кластерах.* Для системы N частиц рассмотрим следующие величины

$$e^{-\beta W(r;\beta)} \equiv \frac{(2\pi\beta)}{2\pi r} \int D\vec{r}_1(\tau) \ldots D\vec{r}_N(\tau)\, \delta\left(r - |\frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta \vec{r}_i(\tau) d\tau|\right)\, e^{-\int\limits_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2}\dot{\vec{R}}(\tau)^2 + V(\vec{R}(\tau))\right]}$$

$$e^{-\beta W(\phi;\beta)} \equiv (2\pi\beta) \int D\vec{r}_1(\tau) \ldots D\vec{r}_N(\tau)\, \delta\left((\phi_{i_m} - \phi_{i_{m+1}}) - \phi\right)\, e^{-\int\limits_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2}\dot{\vec{R}}(\tau)^2 + V(\vec{R}(\tau))\right]} \tag{3.32}$$

где $\vec{R}(\tau) = \{\vec{r}_1(\tau), \ldots, \vec{r}_N(\tau)\}$ - радиус вектор пространства траекторий; i - передвигаемая частица, которая переходит с оболочки на оболочку (r меняется в пределах $(0, R_0)$; R_0 - характерный размер кластера); i_m, i_{m+1} - ближайшие частицы с двух соседних оболочек, $\phi_{i_m}, \phi_{i_{m+1}}$ - угловое положение центра масс траекторий $\vec{r}^{\,c}_{i_m(i_{m+1})} = \frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta \vec{r}_{i_m(i_{m+1})}(\tau)\, d\tau$ относительно оси, проходящей через центр системы (см. Рис. 3.9(b)). Интересно отметить прямую аналогию выражений (3.32) с потенциалом среднего поля, введенного ранее для классических систем (3.20). Основное отличие выражения (3.32) от классического предела заключается в использовании функций распределения радиального и углового положения *центра масс траекторий*. В предельном случае $\beta \to 0$ соотношения (3.32) переходят в выражения для классических барьеров (3.20).

Продолжим изучение плавления квантовых кластеров. По аналогии с классическими системами, воспользуемся критерием Линдемана и будем анализировать зависимость угловых (3.10), радиальных и межчастичных флуктуаций (3.11) от параметра квантовых флуктуаций n и температуры T. Результаты наших расчетов показывают, что вблизи ориентационного и радиального плавления эти флутуации испытывают резкий скачок, а типичный пример их поведения показан на Рис. 3.19. Поведение флуктуаций исследовалось как в зависимости от n при фиксированном значении T, так и в зависимости от T при $n = const$. Другими словами, первый случай соответствовал зависимости от параметра r_s, а второй от Γ. Температурная зависимость флуктуаций анализировалась, главным образом, в классической области фазовой диаграммы (n, T), где двухстадийное плавление кластеров характеризуется некоторым критическим значением температуры T (или $\Gamma = 1/T$), см. Табл. 3.3. С другой стороны в квантовом пределе при $T \ll 1$ свойства системы должны определяться параметром r_s (или $n = r_s^{-1/2}$), характеризующим силу квантовых флуктуаций. Чтобы подчеркнуть особенности квантового плавления рассмотрим зависимость межчастичных флуктуаций от параметра n. На Рис. 3.19 показана зависимость флуктуаций u_ϕ и u_r магических кластеров $N = 12$ и $N = 19$ при фиксированной температуре $T = 5 \times 10^{-4}$. Первое резкое изменение флуктуаций при сравнительно малом значении n_o соответствует квантовому ориентационному плавлению. Вычисление дисперсии угловых расстояний между частицами с разных оболочек также свидетельствует о том, что при плотностях $n \geq n_o$ оболочки находятся в ориентационно разупорядоченной фазе. Интересно, что как и в классических кластерах, нами было обнаружено, что критические значения квантового плавления n_o сильно зависят от симметрии ("магичности") конфигураций основного состояния. Наибольшей ориентационной стабильностью (высокие значения n_o) обладают магические кластеры, причем в особенности кластеры с зародышами "объемной" фазы с гексагональной симметрией, например кластер $N = 19$. Критические значения "холодного" ориентационного плавления n_o^* были получены экстраполяцией данных до температуры $T = 0$. Критические значения для разных чисел N, а также значения параметра $r_s^{(o)}$ приведены в таблице Табл. 3.3.

Продолжим изучать поведение флуктуаций на Рис. 3.19 при более высоких плотностях. Второй скачок флуктуаций u_ϕ и u_r связан с радиальным плавлением оболочек. На Рис. 3.19 также показаны мгновенные конфигурации электронной плотности кластера $N = 19$ в трех фазовых состояниях: a) до ориентационного плавления ($n = 0.025$), b) после ориентационного плавления ($n = 0.06$), c) после радиального плавления ($n = 0.14$).

На Рис. 3.20 показано изменение электронной плотности кластера $N = 11$, которое сопровождает квантовое радиальное плавление. Видно, что с увеличением плотности волновые функции расширяются в радиальном и угловом направлениях пока их ширина не становится порядка межчастичного расстояния. В результате возрастает вероятность перескока электронов между соседними оболочками, что в свою очередь приводит к наблюдаемому резкому росту радиальных флуктуаций. Это поведение флуктуаций наблюдается вдоль всей границы радиально упорядоченной фазы кулоновских кластеров. В предельном случае $T \to 0$ происходит "холодное" плавление. Критические значения n_r^* и параметра $r_s^{(r)}$ в случае "холодного" плавления и для разных чисел N приводятся в Табл. 3.3.

Стоит также отметить, что описанные процессы плавления не приводят к каким-либо особенностям в поведении основных термодинамических функций. Внутренняя энергия (Рис. 3.21), теплоемкость (Рис. 3.22), радиальные и парные корреляционные функции (Рис. 3.23) в течении ориентационного и

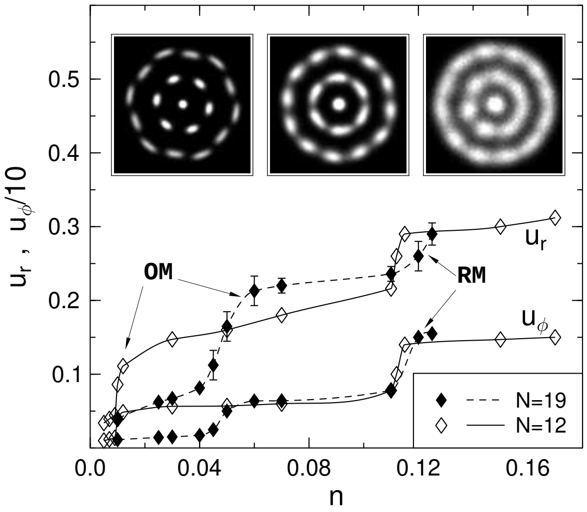


Рис. 3.19: Относительные угловые u_ϕ (3.10) и межчастичные u_r (3.11) флуктуации вблизи ориентационного (OM) и радиального (RM) плавления для $N = 12$ и $N = 19$ в зависимости от параметра квантовых флуктуаций n. В верхней части показаны мгновенные равновесные конфигурации электронной плотности, $N = 19$, в трех состояниях $n = 0.025$, $n = 0.06$, $n = 0.14$. Температура $T = 5.0 \times 10^{-4}$. Показанные статистические ошибки типичны для всех кривых.

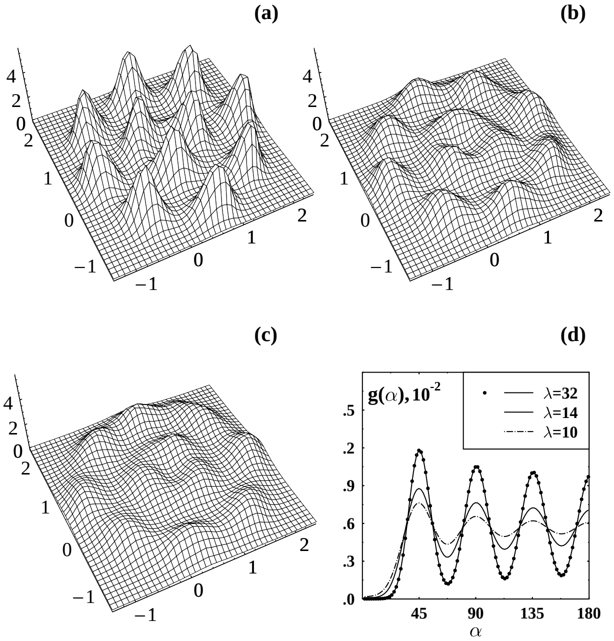


Рис. 3.20: Электронная плотность кластера $N = 11$ при трех значениях параметра флуктуаций $n = (2^{1/2}\lambda^2)^{-1/3}$, $\lambda = e^2/\epsilon_b l_0 \hbar\omega_0$. a) До радиального плавления, b) на границе радиально упорядоченной фазы, c) в фазе жидкого кристалла, d) парная корреляционная функция угловых расстояний α для электронов на внешней оболочке в случае (a)-(c). Температура $T = 1.0 \times 10^{-3}$.

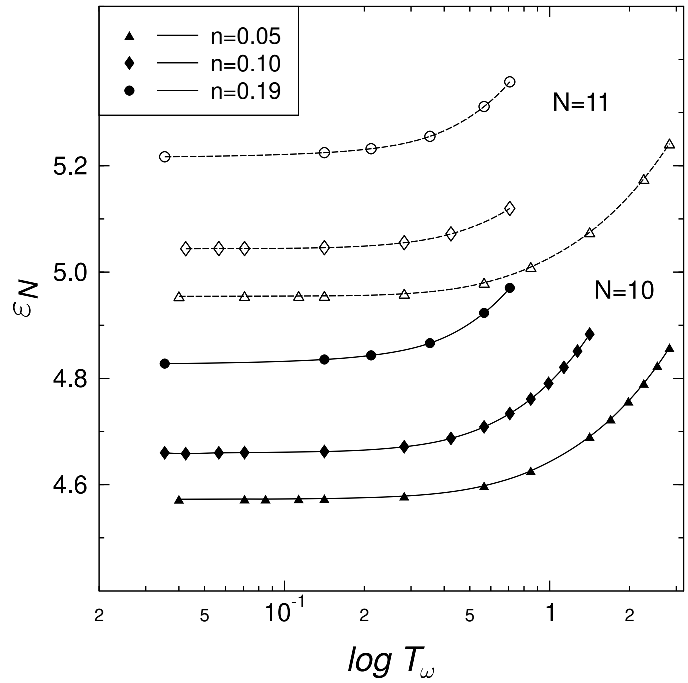


Рис. 3.21: Зависимость удельной энергии $\varepsilon_N = E/N$ кластеров $N = 10$ и $N = 11$ от температуры $T_\omega = k_B T/\hbar\omega_0$ при трех значениях параметра флуктуаций n.

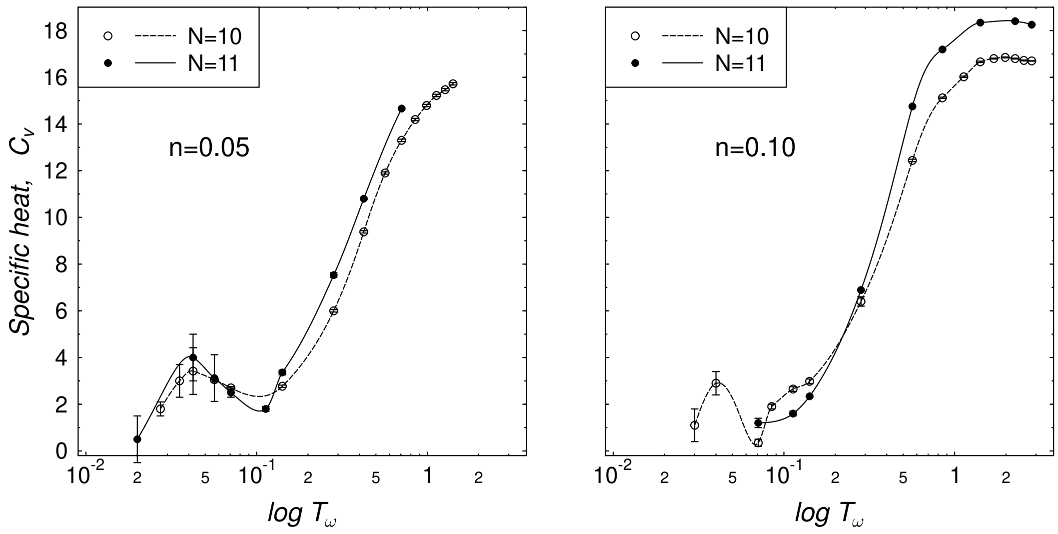


Рис. 3.22: Зависимость теплоемкости кластеров $N = 10$ и $N = 11$ от температуры $T_\omega = k_B T/\hbar\omega_0$ при двух значениях параметра флуктуаций n (теплоемкость в единицах k_B).

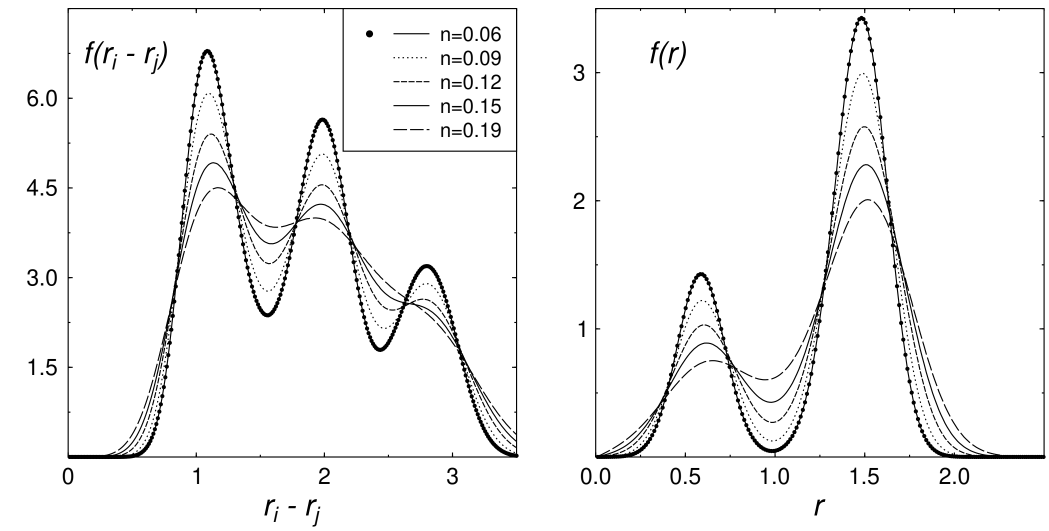


Рис. 3.23: Парные $f(r_i - r_j)$ и радиальные $f(r)$ функции распределения кластера $N = 12$ в зависимости от параметра флуктуаций n. Температура $T_\omega = k_B T/\hbar\omega_0 = 0.04$.

радиального плавления меняются достаточно плавно и не позволяют точно установить критические значения параметров $\{n, T\}$. Стоит также отметить, что температурная зависимость темплоемкости квантовых кластеров совпадает с поведением теплоемкости системы независимых квантовых осцилляторов с частотой ω, перенормированной межчастичным взаимодействием.

3.3.3 Фазовая диаграмма

Значения критических температур и плотностей, при которых наблюдается резкий рост флуктуаций, использовались для построения фазовой диаграммы мезокопических кластеров (см. Рис. 3.24). Плавление происходит в две стадии, а "кристаллическая" фаза имеет две границы. Рассмотрим сначала границу радиального плавления. При низких плотностях, $n < 0.03$, плавление происходит вдоль прямой, угол наклона которой определяется некоторым критическим значением параметра неидеальности $\Gamma = 1/T_r^*$ (см. Табл. 3.2). Было обнаружено, что для магических (немагических) кластеров, найденные Γ лежат выше (ниже) известного критического значения $\Gamma_\infty = 137$ для макроскопических 2D систем. Немагические кластеры оказываются более устойчивыми к радиальным флуктуациям, вызывающих плавление оболочек. Аналогичная тенденция прослеживается и в случае "холодного" плавления, где критические значения параметра квантовых флуктуаций n_r^* у немагических кластеров оказываются больше. Необходимо отметить, что для всех

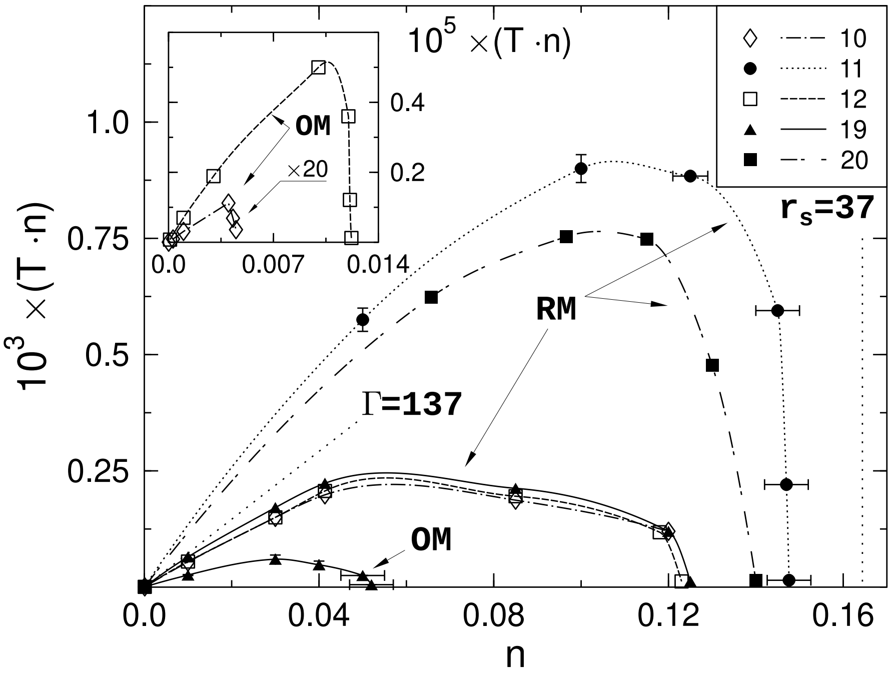


Рис. 3.24: Фазовая диаграмма 2D мезоскопических кластеров. Зависимости "OM" ("RM") - границы ориентационно (радиально) упорядоченной фазы для $N = 10, 11, 12, 19, 20$. В верхней части, в увеличенном масштабе, показана область низких температур и плотностей. Пунктирные линии $\Gamma = 137$ ($r_s = 37$) - фазовая граница вигнеровского кристалла в протяженной классической (квантовой) 2D системе. $r_s = 1/n^2$. Показанные статистические ошибки типичны для всех кривых.

исследованных сравнительно небольших кластеров $10 \leq N \leq 20$ критические значения r_s (Табл. 3.3) превосходят критическое значение $r_s^\infty \approx 37$, найденное для протяженной 2D системы [100]. Это систематическое отклонение от критических данных для макроскопических систем свидетельствует об ином механизме плавления в кластерах. Например, для квантовых точек с числом электронов $N = 10$ (19) плавление происходит в тот момент, когда температура становится порядка потенциального барьера, разделяющего конфигурации глобального и локального минимума. В точке плавления эти кластеры можно обнаружить в одной из конфигураций: $\{2, 8\} \leftrightarrow \{3, 7\}$ ($\{1, 6, 12\} \leftrightarrow \{1, 7, 11\}$). Особенно интересным явлением, которое отсутствует в макроскопических системах, является существование второго фазового перехода, который характеризуется степенью взаимной упорядоченности оболочек - граница "OM" на Рис. 3.24. Ориентационно упорядоченная фаза может существовать только при достаточно низких температурах и плотностях, а ее фазовая граница оказывается чувствительной к угловой симметрии кластера. Наиболее симметричные (“магические”) кластеры отличаются особенной устойчивостью к ориентационному плавлению. Это подтверждают данные для критических значений Γ_o^* и $r_s^{(o)}$ в Табл. 3.2 и 3.3. Значения этих параметров для немагических кластеров оказываются на несколько порядков больше, что ограничивает существование в этих кластерах ориентационно упорядоченной фазы в области очень низких температур и плотностей. В последних двух колонках Табл. 3.3 приводятся также максимальные значения температур, при которых возможно наблюдение ориентационно и радиально упорядоченных фазовых состояний.

Предсказания рассмотренной модели и фазовая диаграмма могут оказаться полезными при исследовании как термодинамических, так и транспортных свойств систем отталкивающихся частиц во внешних полях. Данные фазовой диаграммы указывают на характерные области температур и плотностей, при которых в конечных 2D системах электронов [дырок] в гетероструктурах возможно наблюдение “кристаллических” состояний. В частности, в GaAs/AlGaAs структурах, кристаллизация возможна при плотностях основных носителей заряда (электронов [дырок]) приблизительно $10^8 cm^{-2}$ [$10^9 cm^{-2}$] и температурах ниже $1.6K \ldots 5.5K$, при характерных значениях удерживающего потенциала от 3 до 10 meV.

Таблица 3.2: *Классические* кулоновские кластеры: критические значения температуры T^* и классического параметра взаимодействия Γ^* для ориентационного (o) и радиального (r) плавления кластеров размера N в классическом пределе ($n \to 0$). Во второй колонке приводятся числа заполнения оболочек. "Немагические" кластеры выделены курсивом.

N		T_o^*	Γ_o^*	T_r^*	Γ_r^*
10	2,8	1.5×10^{-5}	6.7×10^4	5.9×10^{-3}	169
11	3,8	*2.6×10^{-7}*	*3.85×10^6*	*1.25×10^{-2}*	*80*
12	3,9	8.0×10^{-4}	1250	6.0×10^{-3}	166
16	1,5, 10	1.7×10^{-3}	590	6.2×10^{-3}	161
19	1,6,12	3.0×10^{-3}	330	6.5×10^{-3}	154
20	1,7,12	*2.9×10^{-12}*	*3.4×10^{11}*	*1.2×10^{-2}*	*83*

Таблица 3.3: *Квантовые* кулоновские кластеры: критические значения параметра флуктуаций и плотности r_s для ориентационного (o) и радиального (r) плавления при *нулевой температуре.* $\tilde{T}_{o,(r)}^{max}$ - максимальное значение температуры плавления, $\tilde{T} \equiv n \cdot T$. Критические значения $n_o^*, r_s^{(o)}$ и $\tilde{T}_o^{max}$ для кластеров $N = 11$ и $N = 20$ полученны из соотношений $n_{o,r}^* \sim \sqrt{T_{o,r}^*}$ и $\tilde{T}_{o,r}^{max} \sim n_{o,r}^*/(2\Gamma_{o,r}^*)$ и находятся в хорошем количественном соотвествии с численными данными.

N	n_o^*	$r_s^{(o)}$	n_r^*	$r_s^{(r)}$	$\tilde{T}_o^{max}$	$\tilde{T}_r^{max}$
10	4.5×10^{-3}	4.9×10^4	0.120	69	5.0×10^{-8}	2.2×10^{-4}
11	*5×10^{-3}*	*4×10^6*	*0.148*	*45*	*7×10^{-11}*	*9.4×10^{-4}*
12	1.4×10^{-2}	5102	0.123	66	5.0×10^{-6}	2.4×10^{-4}
19	5.0×10^{-2}	400	0.125	64	6.0×10^{-5}	2.5×10^{-4}
20	*1.7×10^{-6}*	*3×10^{11}*	*0.140*	*51*	*3×10^{-18}*	*7.5×10^{-4}*

Заключение

Основные результаты диссертации можно сформулировать следующим образом:

1. Разработан комплекс вычислительных программ, позволяющий исследовать равновесные и динамические свойства взаимодействующих квантовых систем новым методом квантовой динамики в рамках вигнеровского представления квантовой механики.

2. С помощью метода квантовой динамики исследована эволюция волнового пакета при прохождении через туннельный барьер. Вычислены вероятность прохождения пакета и туннельный ток. Показано, что за барьером возможно экспериментальное измерение отрицательных "временных задержек" связанных с тем, что через барьер проходят преимущественно высокоэнергетические Фурье-компоненты волнового пакета.

3. С помощью метода квантовой динамики исследована одномерная локализация электронов в неупорядоченных системах. Вычислена электронная проводимость и показано, что она резко убывает в окрестности нулевой частоты, что указывает на локализацию электронов. Анализ пространственной дисперсии при низких температурах показывает, что она практически постоянна и не зависит от времени. Это также свидетельствует о локализации.

4. С помощью метода квантового Монте-Карло интегрирования по траекториям изучены двумерные мезоскопические кластеры частиц, отталкивающихся по кулоновскому закону и удерживаемые внешним квадратичным потенциалом. Показано, что при низких температурах они имеют оболочечную структуру. Найдены конфигурации системы в локальных и глобальных минимумах потенциальной энергии. При увеличении числа частиц в кластерах зарождается фрагмент треугольной решетки.

5. Также исследованы температурные зависимости различных физических величин и процессы плавления в кулоновских кластерах. Показано, что во всех мезоскопических кластерах плавление происходит в две стадии: сначала оболочки теряют свой ориентационный порядок, а при более высоких тем-

пературах происходит радиальное плавление, при котором разные оболочки могут обмениваться частицами. Обнаружена сильная зависимость температур плавления от конфигураций оболочек в кластерах.

6. Для кулоновских кластеров в классическом и в квантовом режимах изучены потенциальные барьеры для перескока частиц между оболочками и для относительного вращения оболочек. В классическом пределе обнаружена следующая закономерность: высота барьера больше температуры плавления примерно в 10 раз. На основе этого предложен новый способ предсказания температур плавления оболочек кластеров.

7. Для системы мезоскопических кластеров в двух разделенных параллельных слоях изучены структурные перестройки, возникающие при изменении расстояния между слоями. Обнаружено, что начиная с некоторого расстояния в системе происходит формирование "объемной фазы" - частей ромбической и прямоугольной решетки, при этом ориентационное плавление исчезает и плавление становится одностадийным. Обнаружена дополнительная стабилизация кластеров за счет кулоновских корреляций между частицами из разных слоев.

8. В фазовой плоскости плотность-температура исследована фазовая диаграмма квантовых кластеров, подчиняющихся статистике Ферми, определены значения критических параметров "холодного" плавления, которое происходит за счет квантовых флуктуаций. Показана специфика квантового ориентационного и радиального плавления.

В заключение хотелось бы выразить глубокую благодарность моему научному руководителю - профессору Ю.Е. Лозовику за внимание и постановку интересных задач, моему отцу В.С. Филинову за неоценимую помощь на начальных этапах работы, а также профессору М. Бонитцу за полезное обсуждение результатов диссертации.

Литература

[1] H. Feldmeier and J. Schnack, Molecular dynamics for fermions, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 655 (2000)

[2] W.M.C. Foulkes, L. Mitas, R.J. Needs, G. Rajagopal, Quantum Monte Carlo simulations of solids, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001)

[3] D.M. Ceperley, Path Integrals in the Theory of Condensed Helium, *Rev. Mod. Phys.* **67**, 279 (1995)

[4] D.M. Ceperley, Microscopic simulations in physics, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 438 (1999)

[5] M. D. Feit, J. A. Fleck and A. Steiger *J. Comput. Phys.* **47**, 412 (1982).

[6] R. Kosloff, *Numerical grid methods and their application to Schrodinger's equation*, ed. by C. Cerjan (Kluwer, The Netherlands, 1993)

[7] Y. A. Kravtsov *Rep. Prog. Phys.* **39**, 2087 (1988)

[8] Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С., *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике* (М., Наука, 1977)

[9] B. J. Berne and Thirumalai *Rev. Phys. Chem.* **37**, 401 (1988)

[10] D. Chandler, Theory of quantum processes in liquids, *Liquids, freezing and glass transition. Part I.*, 194-285 (1991)

[11] T. Reese and B. Miller, Positronium in xenon: The path-integral approach, *Phys. Rev. E* **47**, 2581 (1993)

[12] Виноградов А.П., Филинов В.С., Метод Монте Карло для расчета интегралов от комлекснозначных функций и интегралов Фейнмана, *ДАН* **261**, 333 (1981)

[13] D. Makarov and N. Makri, Path integrals for dissipative systems by tensor multiplication condensed phase quantum dynamics for arbitrarily long time, *Chem. Phys. Lett.* **221**, 482 (1994)

[14] J. D. Doll, D. L. Freeman, and M. J. Gillan, Stationary phase Monte Carlo methods: an exact formulation, *Chem. Phys. Lett.* **143**, 277 (1988)

[15] C. H. Mak, Stochastic method for real-time path integrations, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 899 (1992).

[16] R. Car and M. Parrinello, Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2471 (1985)

[17] H. Azzoaz and J.M. Caillol, D. Levesque et.al., *J. Chem. Phys.* **96**, 4551 (1992)

[18] G. Torre-Vega and J. H. Frederick, A quantum mechanical representation in phase space, *J. Chem. Phys.* **98**, 3103 (1993)

[19] J. J. Wlodarz, On quantum mechanical phase-space wave functions, *J. Chem. Phys.* **100**, 7476 (1994)

[20] W. Loose and G. Ciccotti, Temperature and temperature control in nonequilibrium-molecular-dynamics simulations of the shear flow of dense liquids, *Phys. Rev. A* **45**, 3859 (1992)

[21] D. F. Coker and L. Xiao, Methods for molecular dynamics with nonadiabatic transitions, *J. Chem. Phys.* **102**, 496 (1995)

[22] E. Wigner, On the quantum correction for thermodynamic equilibrium, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932)

[23] Стратонович Р.Л., О распределениях в изображающем пространстве, *ЖЭТФ* **31**, 1012 (1956)

[24] Березин Ф.А., Континуальные интегралы по траекториям в фазовом пространстве, *УФН* **132** в.3, 497 (1980)

[25] Татарский В.И., Вигнеровское представление квантовой механики, *УФН* **139** N4., 587-620 (1983)

[26] V.S. Filinov, Y.E. Lozovik, A.V. Filinov, I. Zacharov and A. Oparin, Quantum dynamics in canonical and micro-canonical ensembles. Part I.

Anderson localization of electrons, *Physica Scripta* **58**, 297 (1998); Part II. Tunneling in double well potential, *Physica Scripta* **58**, 304 (1998)

[27] V.S. Filinov, Y.E. Lozovik, A.V. Filinov et. al., in *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations* (World Scientific Publishing Company, 1998), p.671-691

[28] Лозовик Ю.Е., Филинов А.В., Филинов В.С., Захаров И.Е., Опарин А.М., Квантовая динамика и андерсоновская локализация электронов в неупорядоченных системах рассеивателей, *Извест. Академ. Наук* **62**, N.6, 1179-1185 (1998).

[29] Лозовик Ю.Е., Филинов А.В., Времена прохождения волновых пакетов через туннельные барьеры, *ЖЭТФ* **115**, 1872 (1999)

[30] A.V. Filinov and Yu.E. Lozovik, Tunneling times of wave packets: an application of the method of quantum trajectories in the Wigner representation, in *Progress in Nonequilibrium Greens functions*, ed. by M. Bonitz (World Scientific Publishing Company, 2000), p.529-538

[31] N. Metropolis, W. Rosenbluth, et. al., *J. Chem. Phys.* **21**, 1087-1092 (1953)

[32] M.H. Kalos, and P.A. Whitlock, *Monte Carlo Methods Volume I: Basics* (Wiley, New York) (1986)

[33] A. Goodman and D. Sokal, *Phys. Rev. D* **56**, 1024 (1987)

[34] D.M. Ceperley, and E.L. Pollock, Path Integral Computation of the Low Temperature Properties of Liquid ^{4}He, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 351 (1986)

[35] P.N. Vorontsov-Velyaminov, M.O. Nesvit, and R.I. Gorbunov, Bead-Fourier path-integral Monte Carlo method applied to system of identical particles, *Phys. Rev. E* **55** N2, 1979 (1997)

[36] Yu.E. Lozovik, S.P. Merkulova et.al., in *Proceedings of International Symposium: Nanostructures'97: Physics and Technology*, (St. Petersburg, 1997), p.352-353

[37] L. Eisenbud in *dissertation*, Princeton University, 1948

[38] D. Bohm, p.257-261 in *Quantun Theory* (Prentice-Hall, New York, 1951)

[39] E.P. Wigner, Lower Limit for the Energy Derivative of the Scattering Phase Shift, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955)

[40] M. Buttiker, R. Landauer, Traversal Time for Tunneling, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982)

[41] R. Landauer, Th. Martin, Time delay in wave packet tunneling, *Solid State Commun.* **84**, 115 (1992)

[42] D. Sokolovski, L. Baskin, Traversal time in quantum scattering, *Phys. Rev. A* **36**, 4604 (1987)

[43] D. Sokolovski, J. Connor, Quantum interference and determination of the traversal time, *Phys. Rev. A* **47**, 4677 (1993)

[44] A.J. Baz', *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 161 (1967)

[45] V.F. Rybachenko, *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 635 (1967)

[46] M. Buttiker, R. Landauer, Larmor precession and the traversal time for tunneling, *Phys. Rev. B* **27**, 6178 (1983)

[47] C.R. Leavens, G.C. Aers, *Solid State Commun.* **63**, 1101 (1987)

[48] M. Buttiker, R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **30**, 451 (1986)

[49] Th. Martin, R. Landauer, Modulated barrier approach to the interaction time in tunneling for arbitrary potentials, *Phys. Rev. A* **47**, 2023 (1993)

[50] R. Landauer, *Phys. Chem.* **95**, 404 (1991)

[51] R. Landauer, Th. Martin, Barrier interaction time in tunneling, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994)

[52] J. Kijowski, *Rep. Math. Phys.* **6**, 362 (1974)

[53] P. Busch, M. Grabowski, P.J. Lahti, *Phys. Lett. A* **191**, 357 (1994)

[54] N. Grot, C. Rovelli, R.S. Tate, Time of arrival in quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **54**, 4676 (1996)

[55] V. Delgado, J.G. Muga, Arrival time in quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **56**, 3425 (1997)

[56] Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* **122**, 1649 (1961)

[57] J. Leon, *J. Phys. A* **30**, 4791 (1997)

[58] W. Pauli, p.60 in *Encyclopedia of Physics* **5/1**, edited by S. Flugge, (Springer, Berlin, 1958)

[59] E.P. Wigner, p. 237 in *'Aspects of Quantum Theory'*, ed. by A. Salam and E.P. Wigner (Cambridge, London, 1972)

[60] M. Bauer, P.A. Mello, K.W.Mc Voy, *Z. Physik A* **293**, 151 (1979)

[61] V.S. Olkhovsky, E. Recami, A.J. Gerasimchuk, *Nuovo Cimento* **22**, 263 (1974)

[62] R.S. Dumont and T.L. Marchioro II, Tunneling-time probability distribution, *Phys. Rev. A* **47**, 85 (1993)

[63] E.H. Hauge, J.A. Stovneng, Tunneling times: a critical review, *Rev. Mod. Phys.* **61** N.4, 917 (1989)

[64] W.R. McKinnon, C.R. Leavens, Distributions of delay times and transmission times in Bohm's causal interpretation of quantum mechanics, *Phys. Rev. A* **51** N.4, 2748 (1995)

[65] D. Mugnai, A. Ranfagni, Complex classical trajectories in tunnelling: Instanton bounces can become real processes, IL *Nuovo Cimento* **14** D N.5, 541 (1992)

[66] A. Ranfagni, D. Mugnai, P. Fabeni, G.P. Pazzi, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 774 (1991)

[67] A.M. Steinberg, P.G. Kwiat, R.Y. Chiao, Measurement of the single-photon tunneling time, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 708 (1993)

[68] A. Enders, G. Nimtz, Photonic-tunneling experiments, *Phys. Rev. B* **47**, 9605 (1993)

[69] Ch. Spielmann, R. Szipocs, A. Sting and F. Krausz, Tunneling of optical pulses through photonic band gaps, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2308 (1994)

[70] N.C. Kluksdahl, A.M. Kriman, D.K. Ferry, Self-consistent study of the resonant-tunneling diode, *Phys. Rev. B* **39**, 7720 (1989)

[71] P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Disordered electronic systems, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985), and references therein

[72] B. Kramer and A. MacKinnon, Localization: theory and experiment, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993), and references therein

[73] P.W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)

[74] N.F. Mott, Electrons in disordered structures, *Adv. Phys.* **16**, 49 (1967)

[75] R. Landauer, Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices, *Philos. Mag.* 21, 863 (1970)

[76] D.J. Thouless, Electrons in disordered systems and the theory of localization, *Phys. Rep.* **13**, 93 (1974)

[77] Зубарев Д. Н., *Неравновесная статистическая термодинамика.* (М., Наука, 1971), с. 415

[78] S. Gredeskul, and V. Freilikher, *Usp. Fiz. Nauk* **160**, 239 (1990)

[79] C.C.Grimes, G.Adams, Evidence for a liquid-to crystal phase transition in a classical two-dimensional sheet of electrons, *Phys. Rev. Lett.* **42** N12, 795-798 (1979)

[80] M.A.Read, W.P.Kirk, *Nanostructure physics and fabrication* (Academic press, Boston, 1989)

[81] R.C. Ashoori, Electrons and artificial atoms, *Nature* (London) **379**, 413 (1996); N.B. Zhitenev et al., Periodic and aperiodic bunching in the addition spectra of quantum dots, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2309 (1997)

[82] E. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934)

[83] V.A. Schweigert and F.M. Peeters, Spectral properties of classical two-dimensional clusters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995)

[84] Yu.E. Lozovik and E.A. Rakoch, Energy barriers, structure, and two-stage melting of microclusters of vortices, Phys. Rev. B **57**, 1214 (1998)

[85] G. Goldoni and F.M. Peeters, Stability, dynamical properties, and melting of a classical bilayer Wigner crystal, *Phys. Rev. B* **53**, 4591 (1996); I.V. Schweigert, V.A. Schweigert, and F.M. Peeters, Melting of the Classical Bilayer Wigner Crystal: Influence of Lattice Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5293 (1999), and references therein

[86] F. Rapisarda and G. Senatore, p. 529 of *Strongly Coupled Coulomb Systems*, G. Kalman et al. (eds.), Plenum Press, New York, (1998)

[87] Ю.Е. Лозовик, В.А. Мандельшам, Кулоновские кластеры в ловушке. Физическая реализация атома Томсона, препринт N15 (1989) (Академия наук СССР, отделение общей физики и астрономии, институт спектроскопии, г.Троицк Московской области)

[88] Yu.E. Lozovik, L.M. Pomirchy, Shell structure of two-dimensional electron clusters, *Phys. stat. sol. (b)* **161**, 11 (1990)

[89] Yu.E. Lozovik and V.A. Mandelshtam, Coulomb clusters in a trap, *Phys. Lett. A* **145** N5, 269-271 (1990)

[90] Yu.E. Lozovik, *УФН* **30**, 912 (1987)

[91] Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam, Classical and quantum melting of Coulomb cluster in a trap, *Phys. Lett. A* **165** N 5/6, 469-472 (1992)

[92] V.M. Bedanov, and F.M. Peeters, Ordering and phase transitions of charged particles in a classical finite two-dimensional system, *Phys. Rev. B* **49**, 2667 (1994), and references therein

[93] M.P. Allen, and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University, New York, 1987)

[94] B. Partoens, V.A. Schweigert, and F.M. Peeters, Classical double-layer atoms: artificial molecules, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3990 (1997)

[95] B. Partoens, A. Matulis, and F.M. Peeters, The two electron artificial molecule, *Phys. Rev. B* 59, 1617 (1999)

[96] D.K. Ferry and S.M. Goodnick, *Transport in nanostructures* (Cambridge university press, Cambridge, 1997)

[97] C. Yannouleas, and U. Landman, Spontaneous Symmetry Breaking in Single and Molecular Quantum Dots, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5325 (1999), and references therein

[98] R. Egger, W. Häusler, C.H. Mak, and H. Grabert, Crossover from Fermi Liquid to Wigner Molecule Behavior in Quantum Dots, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3320 (1999), and references therein

[99] M.D. Jones and D.M. Ceperley, Crystallization of the One-Component Plasma at Finite Temperature, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4572 (1996)

[100] B. Tanatar, and D.M. Ceperley, Ground State of the Two-dimensional Electron Gas, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989)

[101] R.P. Feynman and H. Kleinert, Effective classical partition functions, *Phys. Rev. A* **34**, 5080 (1986)

[102] A.V. Filinov, Yu.E. Lozovik and M. Bonitz, Path Integral Simulations of crystallization of quantum confined electrons, *Phys. stat. sol. (b)* **221**, 231 (2000).

[103] A.V. Filinov, M. Bonitz, and Yu.E. Lozovik, Wigner Crystallization in mesoscopic 2D electron systems, *Phys. Rev. Lett.* **86** Issue 17, 3851-3854 (2001)

[104] A.V. Filinov, M. Bonitz, and Yu.E. Lozovik, Two-dimensional electron crystals in single and double layers. *Contrib. Plasma Phys.* **41** Issue 4, 357-362 (2001).