

Коваль Евгений Александрович

**Квантово-механический анализ двухчастичных
систем с анизотропией взаимодействия во
внешнем поле в двумерном пространстве**

01.04.02 – теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Мележик Владимир Степанович

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Моделирование связанных состояний двухчастичных квантовых систем в двумерной (2D) геометрии	16
1.1. Алгоритм для численного решения задачи на связанные состояния для двухчастичных 2D систем	18
1.2. Энергетические спектры квантовой системы двух атомов в 2D геометрии оптической ловушки	23
Глава 2. 2D квантовое рассеяние двух диполей в плоскости . .	30
2.1. Моделирование с помощью метода дискретной переменной 2D квантового рассеяния <i>на анизотропном рассеивателе</i> (на эллиптическом потенциальном барьере) без формализма парциальных волн	31
2.2. Рассеяние двух неполяризованных диполей в плоскости	43
2.3. Основные выводы	46
Глава 3. Анизотропные особенности 2D атома водорода и экситона во внешнем произвольно направленном магнитном поле .	48
3.1. Проблема связанных состояний 2D атома водорода во внешнем магнитном поле в приближении Борна-Оппенгеймера и с учетом конечной массы протона	50
3.2. Анизотропные свойства энергетического спектра и волновых функций 2D атома водорода и 2D экситона в произвольно направленном магнитном поле	58
3.3. Основные выводы	70

Глава 4. Статистические свойства спектров двумерного атома водорода и экситона в наклонном магнитном поле и квантовый хаос	72
4.1. О влиянии направления магнитного поля на статистические свойства спектра (отталкивание уровней и разрушение оболочечной структуры) и квантовый хаос	73
4.2. Классическая динамика 2D атома водорода в наклонном магнитном поле	80
4.3. Основные выводы	81
Заключение	83
Приложение А. Конечно-разностная аппроксимация краевой задачи	85
Приложение Б. Матричная модификация алгоритма прогонки для семидиагональных блочных матриц	88
Список публикаций по теме диссертации	90
Список цитируемой литературы	92

Введение

Актуальность темы исследования.

В последние годы активно исследуются малоразмерные квантовые системы. В частности, интерес вызывают одномерные (1D), квазиодномерные, двумерные (2D) и квазидвумерные системы [1–12]. Этому способствует быстрое развитие экспериментальных методов создания подобных систем [13–20].

Интерес к системам в двумерном (2D) пространстве инициируется благодаря широкому кругу возникающих в них эффектов и явлений, таких как: переход Березинского — Костерлица — Таулеса [21], дробный квантовый эффект Холла в наклонном внешнем магнитном поле [22, 23], индуцированная магнитным полем сверхпроводимость в квазидвумерных органических проводниках [24], предсказание [25] и открытие [26] графана, представляющего собой квазидвумерный монослой графена, связанный с атомарным водородом, и других.

Технологии лазерного охлаждения (Нобелевская премия 1997) и удержания нейтральных атомов, достижение конденсации Бозе – Эйнштейна в разреженных газах щелочных металлов (Нобелевская премия 2001) способствовали активному развитию экспериментальных методик исследования систем ультрахолодных газов в оптических и магнитооптических ловушках.

В последние годы появились возможности по прецизионному контролю таких свойств системы, как интенсивность межчастичного взаимодействия, числа частиц, плотности, температуры, что предоставляет уникальные возможности для исследования малочастичных квантовых систем, моделирования многочастичных систем в физике конденсированных сред.

В настоящее время *актуальной* является тематика анизотропных взаимодействий и её влияние на свойства систем в физике ультрахолодных газов и диатомных молекул [27–30], ридберговских атомов во внешних полях [20], а также в физике экситонов в полупроводниковых гетероструктурах [18, 19, 31],

которая развивается усилиями многих международных теоретических (см. например, [3, 10, 32]) и экспериментальных [13, 16, 17] групп.

Теория двумерного рассеяния развивается, начиная с 70-х годов, многими авторами. Как следует из классических и недавних работ [33—37], движение квантовой частицы в двумерном пространстве имеет две особенности. В частности, квантовая частица в поле сколь угодно слабого притягивающего потенциала имеет по меньшей мере одно слабо связанное состояние [33, 34, 37]. Кроме того, сечение рассеяния квантовой частицы на *любом* короткодействующем потенциале (включая финитные) бесконечно растет в пределе нулевой полной энергии частицы [33, 35, 36, 38].

Двумерному рассеянию квантовой частицы на центральном потенциале посвящено множество работ (см. монографии и обзоры [39—43]). Однако для анизотропных потенциалов анализ двумерного рассеяния квантовой частицы исследован в сравнительно малом числе работ (см. напр. [44, 45]). В отличие от представленных выше работ по исследованию двумерного рассеяния квантовой частицы на центральном потенциале нами исследуется задача двумерного рассеяния на анизотропном потенциале.

Проблема *анизотропного* квантового рассеяния в двух пространственных измерениях является *актуальной* и привлекла к себе значительное внимание, чему способствовали потенциальные перспективы создания экзотических и сильнокоррелированных квантовых систем с дипольными газами [1, 46]. В частности, активно исследуется анизотропная сверхтекучесть [44], 2D дипольные фермионы [47], и малочастичные дипольные комплексы [48] и др..

Недавние эксперименты с получением ультрахолодных полярных молекул в ограниченной геометрии оптических ловушек [15, 16, 29] предоставляют возможность реализовать эти явления.

Отметим, что исследования 2D квантовых эффектов в физике конденсированного состояния инициированы в 40-х годах, при этом тематика остается актуальной, достаточно упомянуть сверхтекучие пленки [49], высокотемпера-

турную проводимость [50], 2D материалы, такие как графен [51] (Нобелевская премия 2010 г.).

Уникальные возможности для моделирования 2D эффектов в высоко-контролируемых условиях недавно возникли благодаря развитию экспериментальных методов для создания квази-2D Бозе и Ферми ультрахолодных газов [13, 14].

Диполь-дипольное взаимодействие представляет интерес благодаря далекодействующему характеру взаимодействия и его сильной анизотропии. Традиционный метод разложения по парциальным волнам становится неэффективным для описания диполь-дипольного рассеяния из-за сильной анизотропной связи различных парциальных волн в асимптотической области (подтверждаемую в работах [32, 52, 53] для трехмерного пространства).

Недавно достигнут заметный прогресс в анализе 2D и квази-2D рассеяния диполей [44, 54–56]. Для пороговых энергий и для энергий, допускающих квазиклассическое приближение, 2D дипольное рассеяние изучалось для случая поляризованных диполей, направленных ортогонально [54] и под углом к нормали [44] к плоскости рассеяния. *При этом задача рассеяния неполяризованных диполей на плоскости на данный момент практически не исследована, актуальна и представляет собой научный интерес.*

Теория геометрических и фешбаховских резонансов в ультрахолодных газах, резонансных состояний 3D атома водорода во внешних полях относительно хорошо развита: в работах других авторов проанализированы индуцированные конфайнментом резонансы в ультрахолодных газах в 1D и 3D оптических ловушках, появление и физика которых описывается полуаналитическими оценками в работах М.Ольшаного [57] в пределе потенциала нулевого радиуса, Г. Шляпникова с соавторами [58] и др..

Однако на текущий момент в связи с развитием экспериментальных методов имеется запрос на теоретическое исследование систем в 2D геометрии, возникающих в них двухчастичных эффектов. Проведены эксперименты с по-

лучением 2D и квазидвумерных систем из атомов щелочных элементов международными научными группами [14, 17, 46, 59]. Системы в 2D геометрии теоретически исследованы, но существующие по ним результаты часто основаны на простых моделях и получены в приближениях центральносимметричных потенциалов [54], в частности, потенциалов нулевого радиуса [60, 61] и требуют уточнения с учетом реальных межатомных и межмолекулярных потенциалов и геометрии ловушек.

Особенности систем в 2D геометрии требуют глубокого изучения развивающихся в них процессов, в частности исследования, ранее не рассматриваемой, анизотропии взаимодействия частиц (напр., диполь-дипольное взаимодействие в квазидвумерных системах ультрахолодных газов; изучение двумерного атома водорода в произвольно направленных внешних полях), изучения квантовых эффектов в квазидвумерных системах ультрахолодных газов. Это подчеркивает актуальность исследования анизотропных свойств систем с диполь-дипольными взаимодействиями в 2D геометрии.

Первоначально модель “2D” атома водорода исследовалась из чисто теоретических соображений [62–65], и нашла применение для описания сильно анизотропных трехмерных кристаллов [66]. С развитием экспериментальных методов создания систем пониженной размерности и новыми перспективами для разработки полупроводниковых устройств модель “2D” атома водорода была применена для описания эффекта заряженной примеси в 2D системах [67–69] и эффективного взаимодействия в экситонной паре электрон-дырка, движение которых ограничено плоскостью, в полупроводниковых 2D гетероструктурах [70]. В ряде работ исследовались внутренние симметрии модели и причины случайного вырождения, возникающего и в трехмерном (3D) случае [70–72]. В моделях “2D” атома водорода и “2D” экситона (далее кавычки опущены) движение частиц происходит в плоскости, но электромагнитные поля, угловой момент и другие величины не ограничены расположением в плоскости.

Влияние внешнего магнитного поля, перпендикулярно направленного к

плоскости движения частиц, на спектр 2D атома водорода исследовалось с помощью двухточечной аппроксимации Паде [73], метода асимптотических итераций [74], вариационного подхода [4, 5], и аналитически для отдельных значений величины магнитного поля [75].

Однако влияние произвольно направленных магнитных полей на свойства 2D атома водорода на настоящий момент не исследовано и эта проблема является актуальной теоретической исследовательской задачей, рассматриваемой в данной работе.

Исследования спектров атома водорода в сильных магнитных полях [76—78] также обусловлены астрофизическими приложениями: величина магнитного поля в карликовых звездах может достигать $10^2 - 10^5$ Т, а в нейтронных звездах — $10^7 - 10^9$ Т [79].

Статистические свойства энергетического спектра и квантовый хаос в атоме водорода в магнитном поле исследовались в основном для трехмерного (3D) случая. В ряде современных работ (см. напр. [80—83]) показано, что динамика классической модели 3D атома водорода во внешних магнитных полях плавно изменяется от регулярной до хаотической с увеличением величины внешнего магнитного поля.

Проявления квантового хаоса 3D атома водорода в магнитном поле в виде изменения статистических свойств спектра энергетических уровней [84] установлены в большом числе теоретических работ (см. напр. [85, 86]). В работе [87] квантовый хаос исследовался для частного случая атома водорода в конфайнменте в форме параболического квантового провода для магнитного поля, направленного *только* вдоль нормали к атомной плоскости.

Из этого следует, что неизученная на данный момент задача исследования статистических свойств энергетического спектра 2D атома водорода для произвольно направленного магнитного поля представляет научный интерес.

Создание кубитов, отдельных элементов квантовых компьютеров с помощью систем ультрахолодных газов и полярных молекул в оптических ловуш-

ках [88–90], систем ридберговских атомов с контролируемым дипольным взаимодействием [20] и перспективы для топологических квантовых вычислений [91] подчеркивают *актуальность* изучения представленной темы и перспективность развития теоретических и экспериментальных методов для исследований в данном направлении, в будущем, и в прикладных целях.

Цели и задачи диссертационной работы.

Цель настоящей работы заключается в квантово-механическом исследовании двухчастичных систем (неполяризованных диполей на плоскости, атома водорода и экситона) с анизотропией взаимодействия в 2D пространстве. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- Развитие подхода для численного исследования 2D уравнения Шредингера без применения традиционного разложения по парциальным волнам. Разработка численных алгоритмов решения 2D задачи двухчастичного рассеяния и 2D проблемы связанных состояний двух частиц для анизотропного потенциала взаимодействия. Верификация и применение разработанных алгоритмов к модельным задачам и воспроизведение результатов работ других авторов [44, 61] и др..
- Анализ зависимостей энергетических уровней от длины рассеяния в квантовой системе, моделирующей взаимодействие двух атомов в двумерной геометрии оптической ловушки.
- Исследование анизотропных свойств сечения двумерного квантового рассеяния на круговом и эллиптическом потенциальных барьерах.
- Анализ двумерного квантового рассеяния двух неполяризованных диполей в плоскости с учетом их взаимной ориентации. Сравнение характеристик процессов рассеяния для случаев поляризованных и неполяризованных диполей.

- Исследование зависимостей свойств энергетических спектров двумерного атома водорода и двумерного экситона от угла наклона направления магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц.
- Изучение эволюции статистических свойств спектров квантовых систем двумерного атома водорода и двумерного экситона и динамики соответствующих классических систем, квантового хаоса с изменением угла наклона направления магнитного поля.

Научная новизна.

Впервые исследована задача квантового рассеяния двух неполяризованных диполей на плоскости. Выполнен анализ зависимости сечения двумерного квантового рассеяния от взаимной ориентации диполей.

Показано, что увеличение угла между плоскостями поляризации диполей приводит к сужению области резонансных осцилляций, наблюдаемых в столкновениях двух поляризованных диполей, с одновременным уменьшением их амплитуды до полного исчезновения осцилляций.

Выявлен ярко выраженный резонансный характер рассеяния при изменении угла наклона одного из диполей, если другой диполь ориентирован в плоскости рассеяния.

Впервые определены явные анизотропные особенности энергетического спектра и статистических свойств связанных состояний двумерного атома водорода и двумерного экситона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры $GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ в наклонном магнитном поле, а именно: обнаружен эффект выраженной нелинейной зависимости энергетических спектров двумерного атома водорода и двумерного экситона и их статистических свойств с увеличением угла наклона магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц.

Теоретическая и практическая значимость.

Приведенные в диссертационной работе модели позволяют другим исследова-

довательским группам анализировать процессы и эффекты в малоразмерных (2D) квантовых системах двух частиц, в том числе с анизотропным взаимодействием, а именно: позволяют другим исследователям описывать систему двух произвольно ориентированных диполей, двигающихся в плоскости, нейтральную систему двух противоположно заряженных частиц в наклонном магнитном поле в двумерном пространстве.

Разработанные численные алгоритмы могут быть применены для анализа связанных состояний других систем двух частиц с анизотропным потенциалом взаимодействия и двумерного рассеяния двух частиц в плоскости.

Полученные результаты могут быть использованы при проведении запланированных экспериментов по получению и изучению ультрахолодных полярных диатомных молекул RbCs, KCs и CsYb в магнитооптических ловушках в Объединенном квантовом центре и университете Дарема (г. Дарем, Великобритания), экспериментальных исследованиях диполь-дипольных взаимодействий между ридберговскими атомами в Оптическом институте Laboratoire Charles Fabry, Institut d'Optique, CNRS, Univ Paris Sud 11 (Париж, Франция), а также экспериментальными физическими группами МГУ имени М. В. Ломоносова (г. Москва), Института прикладной физики (г. Нижний Новгород), Института физики высоких энергий (г. Москва), ФИАН им. П. Н. Лебедева (г. Москва) и др..

Результаты диссертации представляют *практический интерес* в экспериментальном изучении *двумерных экситонов и физики квантовых точек* в полупроводниковых гетероструктурах в наклонных магнитных полях для контроля их спектров поглощения и испускания с помощью изменения направления и величины напряженности наклонного магнитного поля.

Результаты исследований диполь-дипольных взаимодействий и статистических свойств спектра в произвольно направленном магнитном поле, полученные в данной диссертационной работе, представляют собой *практический интерес* с точки зрения создания кубитов, отдельных элементов квантовых компьютеров,

а также схем квантовых вычислений [88]. Они применимы для описания свойств нескольких ридберговских атомов с диполь-дипольным взаимодействием, являющиеся перспективной платформой для инженерии квантовых состояний с потенциальным применением для квантовой метрологии, квантовой симуляции и квантовой информации [20].

Положения, выносимые на защиту:

- При анализе квантового рассеяния в двумерном пространстве *произвольно ориентированных диполей* в случае взаимной ортогональности их плоскостей поляризации выявлен ярко выраженный *резонансный характер рассеяния при изменении угла наклона одного из диполей*, если другой диполь ориентирован в плоскости рассеяния.
- Показано, что *при двумерном квантовом рассеянии двух неполяризованных диполей увеличение угла между плоскостями поляризации диполей* приводит к сужению области резонансных осцилляций сечения рассеяния с одновременным уменьшением их амплитуды до полного исчезновения осцилляций.
- Впервые обнаружена нелинейная зависимость энергий основного и возбужденных состояний “двумерного” атома водорода и “двумерного” экситона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As от угла наклона α вектора напряженности магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц в широком диапазоне величин напряженности произвольно направленного магнитного поля: с увеличением угла наблюдается эффект значительного уменьшения энергии основного и возбужденных состояний.
- Выявлена существенная зависимость статистических свойств энергетического спектра “двумерного” атома водорода от ориентации вектора напряженности магнитного поля относительно нормали к плоскости движения

частиц. С ростом угла наклона α вырожденные до этого уровня расщепляются и уменьшаются интервалы между кластерами энергетических уровней. При увеличении угла наклона α обнаружен переход распределений межуровневых интервалов энергетического спектра “двумерного” атома водорода от распределения Пуассона к распределению Вигнера, свидетельствующий о возникновении в системе квантового хаоса, что подтверждается результатами проведенного анализа классической динамики системы.

Апробация результатов.

Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова и на следующих конференциях:

1. The 49th Conference of the European Group on Atomic Systems EGAS'49, Durham University, Durham, United Kingdom, 2017
2. IV International Conference On Quantum Technologies ICQT'2017, Russian Quantum Center, Moscow, Russia, 2017
3. 46th Conference of the European Group on Atomic Systems EGAS'46, Lille University, Lille, France, 2014
4. IRTG: Ultracold few- and many-body systems, Freiburg University, Mittelwihr, France, 2016
5. 12th European Conference on Atoms Molecules and Photons, Goethe University, Frankfurt, Germany, 2016
6. XIX Международная научная конференция ОМУС'15, Дубна, ОИЯИ, 2015
7. 12-я Курчатовская молодежная научная школа-конференция, НИЦ Курчатовский институт, Москва, 2014

8. Международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики» МРАМС-2014, Дубна, ОИЯИ, 2014
9. XVIII Международная научная конференция ОМУС'14, Дубна, ОИЯИ, 2014
10. 11-я Курчатовская молодежная научная школа-конференция, НИЦ Курчатовский институт, Москва, 2013
11. XVII научная конференция молодых ученых и специалистов ОМУС'13, Дубна, ОИЯИ, 2013
12. Международная конференция Математическое моделирование и вычислительная физика (ММСР'2013), ОИЯИ, Дубна, 2013
13. Международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (МРАМС-2012), Дубна, ОИЯИ, 2012
14. XVI Международная конференция молодых ученых и специалистов ОИЯИ, Дубна, ОИЯИ, 2012

Степень достоверности.

Достоверность результатов, изложенных в диссертации, обеспечивается тем, что используемые в работе подходы основаны на классических известных и апробированных методах квантовой теории рассеяния. Результаты находятся в полном соответствии с результатами, полученными в теоретических работах других авторов в рамках более простых моделей, а также с данными экспериментальных групп.

Публикации.

Материалы диссертации опубликованы в 9 печатных работах, из них 5

статей в рецензируемых журналах [А1–А5] и 4 статьи в сборниках трудов конференций [А6–А9].

Личный вклад автора.

Автор принимал непосредственное участие в постановке задач диссертационной работы, разработке численных алгоритмов и компьютерных программ для их решения, проведении расчетов, в анализе результатов и публикации статей. Личный вклад соискателя в результаты и основные положения, выносимые на защиту, является определяющим.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, двух приложений и библиографии. Общий объем диссертации 102 страницы, в том числе 89 страниц текста, включая 25 рисунков. Библиография включает 108 наименований на 13 страницах.

Глава 1

Моделирование связанных состояний двухчастичных квантовых систем в двумерной (2D) геометрии

В данной главе мы приводим используемый нами подход для численного решения модельной задачи на связанные состояния. Применяемый нами в данной работе алгоритм решения двумерной задачи связанных состояний двухчастичной системы в полярных координатах с использованием базиса Фурье основывается на методе дискретной переменной, предложенном в работе Мележика В. С. [92] для решения многомерной задачи рассеяния.

Метод [92] применялся к диполь-дипольному рассеянию, индуцированному эллиптически поляризованным лазерным полем [32], в трехмерном пространстве. Этот метод применяется нами для малоразмерного 2D пространства.

Одним из преимуществ выбранного подхода состоит в том, что в отличие от работ других авторов (см., например, [44, 45]) в нем не используется традиционное разложение по парциальным волнам, которое становится неэффективным при сильной анизотропии взаимодействия из-за большого количества вовлеченных парциальных волн и необходимости большого количества базисных функций в разложении волновой функции для достижения сходимости численных результатов. Это позволяет существенно экономить расчетное время.

Разработанный нами численный алгоритм для решения проблемы связанных состояний успешно верифицирован на модельной задаче, симулирующей связанные состояния двух атомов в оптической ловушке в отсутствие магнитного поля.

Отметим, что в описанной модельной задаче применяется *изотропный* потенциал взаимодействия. Получено согласие с результатами работы [61] в ка-

честве положительного результата верификации. Вышеописанный численный алгоритм приведен в разделе [1.1](#) и его применение к модельной задаче в разделе [1.2](#).

1.1. Алгоритм для численного решения задачи на связанные состояния для двухчастичных 2D систем

Двумерное уравнение Шредингера в полярных координатах (ρ, ϕ) имеет вид:

$$H\Psi(\rho, \phi) = E\Psi(\rho, \phi), \quad (1.1)$$

где H — гамильтониан системы, E и $\Psi(\rho, \phi)$ — энергия волновая функция системы.

Для численного решения уравнения (1.1) наш подход использует вариацию метода дискретной переменной, предложенную в работе Мележика В.С. [92] для решения многомерной задачи рассеяния. В трехмерном пространстве метод [92] применялся к диполь-дипольному рассеянию, индуцированному эллиптически поляризованным лазерным полем [32]. Нами метод применен для двумерного пространства.

Для представления волновой функции на равномерной разностной сетке $\phi_j = \frac{2\pi j}{2M+1}$ (где $j = 0, 1, \dots, 2M$) по угловой переменной ϕ нами используются собственные функции

$$\xi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im(\phi-\pi)} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad (1.2)$$

оператора $h^{(0)}(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$ в качестве Фурье базиса. Волновая функция ищется в виде разложения:

$$\Psi(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=-M}^M \sum_{j=0}^{2M} \xi_m(\phi) \xi_{mj}^{-1} \psi_j(\rho), \quad (1.3)$$

где $\xi_{mj}^{-1} = \frac{2\pi}{2M+1} \xi_{jm}^* = \frac{\sqrt{2\pi}}{2M+1} e^{-im(\phi_j-\pi)}$ — обратная матрица к квадратной матрице $(2M+1) \times (2M+1)$ $\xi_{jm} = \xi_m(\phi_j)$, определенной на разностной сетке по угловой переменной.

Для вычисления обратной матрицы ξ_{mj}^{-1} , используется соотношение полноты Фурье базиса $\sum_{m=-\infty}^{\infty} \xi_m(\phi_k) \xi_m^*(\phi_j) = \delta(\phi_k - \phi_j)$, которое на разностной сетке

принимает вид: $\sum_{m=-M}^M \xi_{km} \xi_{jm}^* = \frac{2M+1}{2\pi} \delta_{kj}$.

Радиальные функции $\psi_j(\rho)$ определяются значениями волновой функции на разностной сетке ϕ_j :

$$\psi_j(\rho) = \sqrt{\rho} \Psi(\rho, \phi_j). \quad (1.4)$$

В представлении (1.3) уравнение Шредингера (1.1) преобразуется в систему $(2M + 1)$ связанных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\frac{1}{2m_r} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \psi_j(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \psi_j(\rho) + \sum_{j'=0}^{2M} V_{jj'} \psi_{j'}(\rho) - \frac{1}{\rho^2} \sum_{j'=0}^{2M} h_{jj'}^{(0)} \psi_{j'}(\rho) \right) = E \psi_j(\rho), \quad (1.5)$$

где матрица потенциала диагональна и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной:

$$V_{jj'}(\rho) = V(\rho, \phi_j) \delta_{jj'}, \quad (1.6)$$

если потенциал не содержит операторов интегрирования или дифференцирования. В случае их наличия требуется аппроксимация операторов их конечно-разностными аналогами и матрица потенциала становится недиагональной.

Недиагональная матрица оператора $h^{(0)}$ определяется следующим образом:

$$h_{jj'}^{(0)} = - \sum_{j''=-M}^M j''^2 \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (1.7)$$

Таким образом, проблема связанных состояний двухчастичной малоразмерной 2D системы в полярной системе координат (ρ, ϕ) состоит в решении уравнения Шредингера (1.1) для определения уровней энергии E и собственных функций $\Psi(\rho, \phi)$.

Постановка задачи помимо уравнения (1.5) требует определения граничных условий на радиальные функции. Левое граничное условие для радиальных функций $\psi_j(\rho)$ определяется из условия конечности волновой функции в

нуле ($\Psi(\rho, \phi_j) = \frac{\psi_j(\rho)}{\sqrt{\rho}} \rightarrow const$) и имеет вид:

$$\psi_j(\rho \rightarrow 0) \rightarrow const \times \sqrt{\rho} \quad (j = 0, 1, \dots, 2M), \quad (1.8)$$

правое — из условия стремления волновой функции к нулю на бесконечности:

$$\psi_j(\rho \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (j = 0, 1, \dots, 2M). \quad (1.9)$$

Для решения задачи на собственные значения (1.5),(1.8),(1.9) вводится равномерная разностная сетка по радиальной переменной ρ : $\rho_j = j \frac{\rho_N}{N}$, ($j = 0, 1, 2, \dots, N$).

Для ускорения сходимости также использовалась неравномерная сетка (по аналогии с квазиравномерными сетками [93]): $\rho_j = \rho_N t_j^2$, ($j = 1, 2, \dots, N$), узлы на которой определяются отображением $\rho_j \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$ на равномерную сетку $t_j \in [0, 1]$.

Для дискретизации используется семиточечная конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности для второй производной (см. Приложение А). На равномерной сетке узлов при следующих обозначениях $\{\rho_k = kh, h = \frac{\rho_N}{N}, k = 1, 2, \dots, N-1\}$, $\{\psi^k = \psi(\rho_k)\}$ она имеет вид [94]:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} \Psi^k = \frac{2\Psi^{k-3} - 27\Psi^{k-2} + 270\Psi^{k-1} - 490\Psi^k + 270\Psi^{k+1} - 27\Psi^{k+2} + 2\Psi^{k+3}}{180h^2} + O(h^6). \quad (1.10)$$

В результате такой аппроксимации задачи (1.16) и (1.17) сводятся к алгебраическим уравнениям вида

$$a_k \Psi^{k-3} + b_k \Psi^{k-2} + c_k \Psi^{k-1} + (d_k + E) \Psi^k + e_k \Psi^{k+1} + f_k \Psi^{k+2} + g_k \Psi^{k+3} = h_k, \quad (1.11)$$

с коэффициентами $a_k, b_k, c_k, d_k, e_k, f_k, g_k, h_k$. Правое граничное условие может быть записано в виде (1.11) как в случае задачи на собственные значения, так и в случае задачи рассеяния.

Собственные значения получаемой матрицы гамильтониана определяются численно с помощью метода обратных итераций со сдвигом [95]. Возникающая

на каждой итерации алгебраическая задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [96] для блок-диагональной матрицы. (см. Приложение Б).

Здесь мы приводим обсуждение преимуществ используемого нами представления дискретной переменной в сравнении с традиционным формализмом разложения по парциальным волнам, который в частности был применен К. Тикнором при анализе двумерного рассеяния поляризованных диполей [44].

Во-первых, оценка остаточного члена $\delta\Psi_M$ при разложении волновой функции $\Psi(\rho, \phi) = \sum_{m=-M}^M \chi_m(\rho) e^{im\phi} / \sqrt{\rho} + \delta\Psi_M$ по парциальным волнам неизвестна для любого потенциала $U(\rho, \phi)$. Это обстоятельство становится решающим в случае рассматриваемых нами сильно анизотропных и дальнедействующих потенциалов, для которых разложение по парциальным волнам становится неэффективным из-за сильной связи между различными угловыми моментами остающейся даже в пределе низкой энергии [32, 52].

В противоположность этому, наше представление дискретной переменной принадлежит к классу сеточных методов позволяющих оценить ошибку аппроксимации. Таким образом, поскольку используемое нами представление может рассматриваться как интерполяция Фурье порядка M по переменной ϕ , ошибка аппроксимации $\delta\Psi_M$ может быть оценена в виде [97]:

$$\delta\Psi_M = |\Psi(\rho, \phi) - \sum_{j=0}^{2M} \omega_j(\phi) \Psi(\rho, \phi_j)| < const \times \frac{\ln M}{M^k},$$

где $\omega_j(\phi) = \frac{1}{(2M+1)} \sum_{m=-M}^M e^{im(\phi-\phi_j)}$ и k — это число непрерывным и ограниченными производными по ϕ . Благодаря этой оценке можно ожидать быструю сходимость используемого представления дискретной переменной с увеличением M на последовательности сгущающихся сеток $\{\phi_j\}_0^{2M}$, что подтверждено во всех проведенных нами вычислениях.

Другим важным преимуществом представления дискретной переменной является её гибкость, связанная с времени-затратной процедурой вычисления

матричных элементов потенциала взаимодействия.

Как отмечено выше, матрица потенциала в нашем представлении является диагональной и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной в случае отсутствия в потенциале операторов дифференцирования и интегрирования по угловой переменной.

Материалы по алгоритму для численного решения задачи на связанные состояния для двухчастичных 2D систем, представленные в разделе 1.1, опубликованы в работах [A2, A3].

1.2. Энергетические спектры квантовой системы двух атомов в 2D геометрии оптической ловушки

Проблема связанных состояний в двумерном пространстве обладает рядом особенностей, отличных от трехмерного и одномерного случаев. В частности, следует отметить, что в двумерном пространстве две частицы взаимодействующие со сколь угодно малым потенциалом притяжения образуют связанное состояние, хотя и энергия связи оказывается экспоненциально малой по сравнению с глубиной потенциала [33].

В данном разделе 1.2 представлено решение модельной проблемы связанных состояний квантовых систем двух атомов в двумерной геометрии оптических ловушек в отсутствие магнитных полей, опубликованное в работе [A5].

Исследована зависимость энергий связанных состояний системы от длины рассеяния, а также сходимость полученных численных результатов к аналитическому решению, найденному в работе Busch и др. [61] в приближении потенциала нулевого радиуса для межатомного взаимодействия.

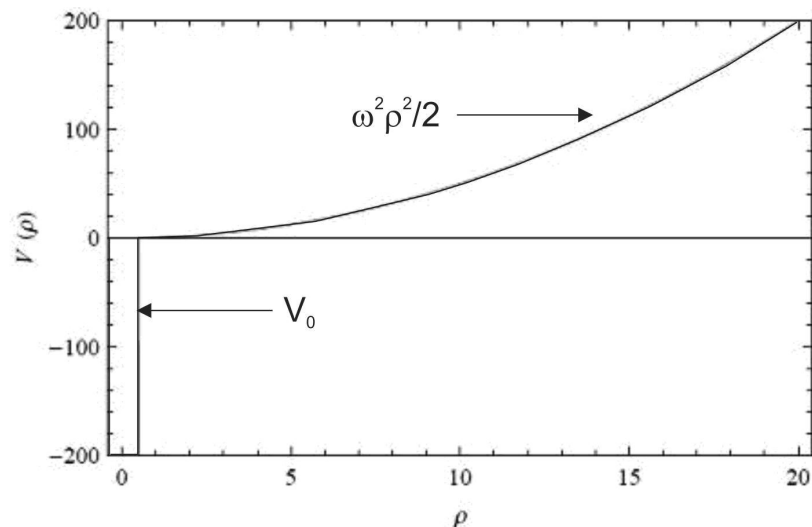


Рис. 1.1. Эффективный потенциал взаимодействия: ширина потенциальной ямы $\rho_0 = 0.5$, частота гармонического осциллятора $\omega = 1$.

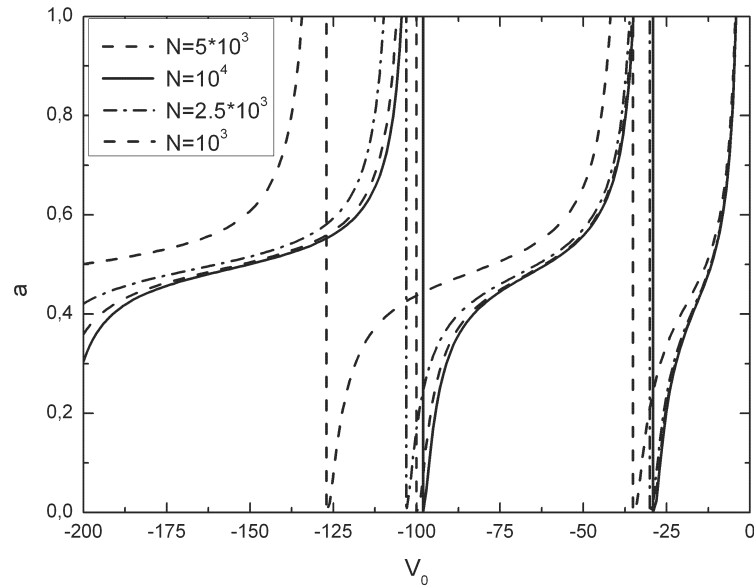


Рис. 1.2. Сходимость по числу точек $N \rightarrow \infty$ сетки по радиальной переменной для длины рассеяния $a(V_0)$.

В модели одномерной атомной ловушки, когда движение вдоль третьей переменной «заморожено», парные столкновения после отделения движения центра масс можно описать двумя переменными (ρ, ϕ) . В работах других авторов [60, 61, 98] взаимодействие моделировалось потенциалом нулевого радиуса вида $V(\rho) = V_0\delta(\rho)$, где $\delta(\rho)$ – дельта-функция Дирака. Здесь мы выходим за рамки этого приближения, используя потенциал:

$$V(\rho) = \begin{cases} V_0, \rho \leq \rho_0 \\ 0, \rho > \rho_0 \end{cases} \quad (1.12)$$

где V_0 – глубина потенциала, ρ_0 – ширина потенциала.

Модельная задача о нахождении спектра системы с аксиально-симметричным потенциалом (1.12) заключается в решении стационарного двумерного уравнения Шредингера для задачи на связанные состояния и для задачи рассеяния.

В полярной системе координат стационарное уравнение Шредингера при-

нимает вид¹:

$$T(\rho, \phi)\Psi(\rho, \phi) + [V(\rho) + V_{ho}(\rho)]\Psi(\rho, \phi) = E\Psi(\rho, \phi), \quad (1.13)$$

где $T(\rho, \phi)$ – оператор кинетической энергии частиц, $V_{ho}(\rho) = \frac{\mu\omega^2\rho^2}{2}$ – потенциал гармонического осциллятора, аппроксимирующий взаимодействие частиц с ловушкой, E – энергия относительного движения частиц, а μ – приведенная масса.

Поставленная задача решалась для суперпозиции потенциала (1.12) и гармонического осциллятора $V_{ho}(\rho)$, изображенной на рис. 1.1. Нами рассмотрена узкая (ширина потенциальной ямы $\rho_0 = 0.5$) и глубокая (глубина $V_0 = -200$) потенциальная яма, моделирующая при $\rho_0 \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$ потенциал нулевого радиуса $V_0\delta(\rho)$, рассмотренный в работе [61].

Аксиальная симметрия потенциала взаимодействия (1.12) допускает разделение переменных ρ и ϕ . Для наглядности запишем исходное уравнение (1.13) в формализме 2D парциальных волн [33]:

$$\Psi(\rho, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \Psi^{(m)}(\rho) e^{im\phi}, \quad (1.14)$$

где $\phi \in [0, 2\pi]$, которое распадается на радиальные уравнения.

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{4\rho^2} + \left[2E - 2V(\rho) - 2V_{ho}(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2} \right] \right) \Psi^{(m)}(\rho) = 0 \quad (1.15)$$

для компонент $\Psi^{(m)}(\rho)$. Далее мы анализируем случай $m = 0$, соответствующий s -волне.

Доопределив уравнение (1.15) граничными условиями при $\rho \rightarrow 0, \rho \rightarrow \infty$ для радиальной компоненты $\Psi^{(0)}(\rho)$, задача на собственные значения E_n приобретает вид:

$$\begin{cases} \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \Psi_n^{(0)}(\rho) + \left[\frac{1}{4} + 2\rho^2(E_n - V_{ho}(\rho) - V(\rho)) \right] \Psi_n^{(0)}(\rho) = 0, \\ \Psi_n^{(0)}(0) = \Psi_n^{(0)}(\infty) = 0, \end{cases} \quad (1.16)$$

¹ здесь и далее используется система единиц $\hbar = \mu = 1$

а задача рассеяния записывается в следующей форме:

$$\begin{cases} \frac{d^2}{d\rho^2} \Psi^{(0)}(\rho) + \left(k^2 - \left[2V(\rho) - \frac{1}{4\rho^2} \right] \right) \Psi^{(0)}(\rho) = 0, \\ \Psi^{(0)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \sqrt{\rho}, \\ \Psi^{(0)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \cos(\delta_0) \left[\sqrt{k\rho} J_0(k\rho) - \operatorname{tg}(\delta_0) \sqrt{k\rho} N_0(k\rho) \right], \end{cases} \quad (1.17)$$

где $k = \sqrt{2E}$ – относительный импульс частиц, J_0 и N_0 – функции Бесселя и Неймана нулевого порядка, δ_0 – фаза рассеяния s -волны (в отсутствии потенциала $\delta_0 = 0$ и решением уравнения (1.17) является функция $\sqrt{\rho} J_0(k\rho)$). Длина рассеяния в двумерном квантовом рассеянии определяется в пределе $k \rightarrow 0$ в виде [99]²:

$$a = \frac{2}{k} \exp \left(\frac{\pi}{2} c \operatorname{tg}(\delta_0) - \gamma \right). \quad (1.18)$$

В случае задачи рассеяния при дискретизации уравнений с помощью конечно-разностной аппроксимации (см. Приложение А) неизвестная функция δ_0 исключается из граничных условий путем использования асимптотики $\Psi_0(\rho \rightarrow \infty)$ в двух конечных точках ρ_{N-1} и ρ_N [92] и асимптотическое условие на бесконечности для радиальных волновых функций приводится к виду (1.11). Задача рассеяния (1.17) при заданной энергии столкновения E решалась методом прогонки (см. Приложение Б). Более детально используемый численный подход для решения задачи двумерного рассеяния квантовой частицы изложен в подглаве 2.1.

С помощью решения задачи на собственные значения (1.16) и задачи рассеяния (1.17) нами вычислены искомые зависимости энергетического спектра от длины рассеяния и получено согласие наших численных результатов для энергий уровней с аналитическими решениями [61], иллюстрируемое на рис. 1.3.

Рассчитанная зависимость энергии в единицах частоты гармонического осциллятора ω от величины $L \equiv 1/\ln(\frac{1}{2a^2})$ представлена на рис. 1.3 сплошной «жирной» линией, а аналитическое решение [61] – сплошной тонкой линией, асимптоты соответствующих уровней в случае $\omega = 1$ – штриховыми линиями.

² $\gamma \approx 0.5772156649$ – константа Эйлера

Наблюдаемое расхождение наших результатов с аналитическими обусловлено отличием приближений потенциала нулевого радиуса и узкой прямоугольной потенциальной ямы конечной ширины и глубины. Расчеты были проведены при $\rho_N = 60$ и $q = 0.01$ на сгущающихся сетках $N \rightarrow \infty$ по радиальной переменной.

Для изучения влияния потенциала ловушки на спектр изучаемой системы численно исследована зависимость энергии связанных состояний от параметра ловушки ω , иллюстрируемая на рис. 1.4. Из анализа рис. 1.4 следует, что при увеличении ω существенно возрастает энергия основного состояния и незначительно увеличиваются энергии возбужденных состояний.

Разработанная вычислительная схема успешно применена для вычисления зависимости спектра энергий связанных состояний двух атомов в двумерной геометрии оптической ловушки от длины рассеяния, алгоритм был протестирован с использованием метода семиточечной прогонки, применяемого для решения краевой задачи (1.11).

Метод семиточечной прогонки позволяет хранить матрицу системы линейных алгебраических уравнений в компактном виде и находить ее численное решение за малое, по сравнению с другими численными методами решения системы линейных алгебраических уравнений, число операций. На рис. 1.2 для задачи (1.17) продемонстрирована сходимость вычислительной схемы в зависимости от числа точек N по сетке радиальной переменной.

Анализ рис. 1.2–1.3 приводит к выводу о том, что данный численный алгоритм успешно применим для моделирования зависимости энергий связанных состояний системы двух атомов от длины рассеяния и глубины V_0 потенциала в двумерном пространстве, и может быть использован и в случае реалистичных потенциалов взаимодействия.

В работе численно исследован спектр двухчастичных квантовых систем в двумерной (2D) геометрии атомных ловушек, актуальной задачи физики ультрахолодных атомов. Двумерная геометрия вносит ряд существенных особенно-

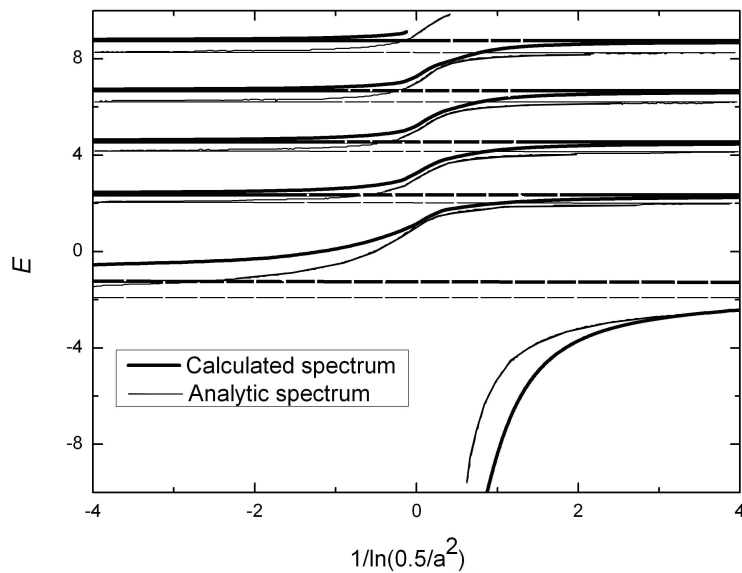


Рис. 1.3. Зависимость рассчитанного спектра энергий E связанных состояний и аналитических кривых $E(L)$ [61], от значений величины $L = 1/\ln\left(\frac{1}{2a^2}\right)$ при частоте осциллятора $\omega = 1$.

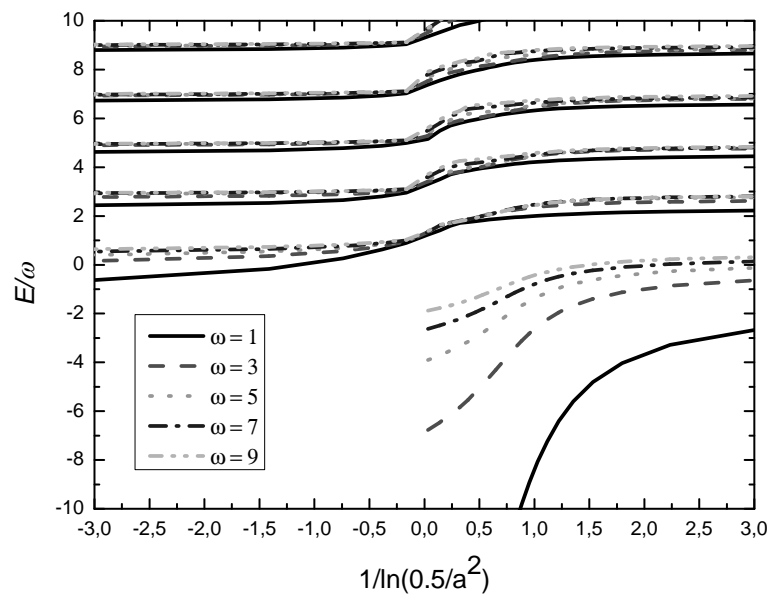


Рис. 1.4. Зависимость энергий E связанных состояний от частоты оптической ловушки ω .

стей как в задачу на собственные значения, так и в задачу рассеяния по сравнению с классической теорией в трехмерном пространстве, в частности, длина рассеяния $a = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{2}{k} \exp\left(\frac{\pi}{2} ctg(\delta_0) - \gamma\right)$ всегда положительна в таких системах.

Нами построена вычислительная схема для исследования квантовой задачи двух тел, допускающей отделение центра масс, в 2D геометрии. Продемонстрировано согласие численных расчетов с аналитическими результатами работ [60, 61, 98], полученными в приближении потенциала нулевого радиуса для межатомного взаимодействия.

Результаты, представленные в разделе 1.2, опубликованы в работах [A5, A9].

Глава 2

**2D квантовое рассеяние двух диполей в
ПЛОСКОСТИ**

В данной главе изложен подход численного решения задачи двумерного квантового рассеяния, представлено его применение к модельной задаче рассеяния на круговом и эллиптическом потенциальных барьерах и описание 2D столкновений неполяризованных диполей, выявлены причины возникновения и особенности резонансной структуры в сечении рассеяния двух поляризованных диполей и её трансформация с изменением взаимного расположения двух диполей.

Двумерная задача рассеяния возникает, например, при описании столкновений ультрахолодных атомов и молекул в оптической ловушке, где движение частиц “заморожено” вдоль одного направления, и их динамика ограничена движением в плоскости.

В частности, подобные двумерные системы изучались экспериментально в работах [13, 100]. Особый интерес представляет учет анизотропии во взаимодействии между атомами и полярными молекулами с большими дипольными моментами в связи с возможностью моделирования сильнокоррелированных квантовых систем, что было продемонстрировано в недавних экспериментах с ультрахолодными полярными молекулами LiCs и LiK в трехмерной геометрии ловушек [101, 102].

2.1. Моделирование с помощью метода дискретной переменной 2D квантового рассеяния *на анизотропном рассеивателе* (на эллиптическом потенциальном барьере) без формализма парциальных волн

Цель данного раздела 2.1 состоит в изложении используемого подхода для численного моделирования 2D квантового рассеяния с помощью метода дискретной переменной без формализма парциальных волн, его применению к рассеянию на эллиптическом потенциальном барьере, а также в представлении результатов исследования особенностей резонансной структуры в сечении рассеяния двух поляризованных диполей.

2.1.1. Решение 2D квантовой задачи рассеяния на анизотропном рассеивателе

Задача состоит в численном решении двумерного уравнения Шредингера в полярных координатах (ρ, ϕ) со специальной асимптотикой для $\psi(\rho, \phi)$ в пределе $\rho \rightarrow \infty$:

$$\begin{cases} H(\rho, \phi)\psi(\rho, \phi) = E\psi(\rho, \phi) \\ \psi(\rho, \phi) \rightarrow e^{i(\vec{q}\vec{\rho})} + f(q, \phi) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}}, \end{cases} \quad (2.1)$$

где гамильтониан $H(\rho, \phi)$ имеет вид:

$$H(\rho, \phi) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} h_0(\phi) \right) + U(\rho, \phi). \quad (2.2)$$

Здесь $q = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$ обозначает относительный импульс частиц, E – энергию столкновения, μ – приведенную массу, ϕ есть угол рассеяния и $h_0(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$.

Поставленная задача аналогична задаче определения амплитуды рассеяния $f(q, \phi)$ [33], но в отличие от проблемы [33] изучается случай анизотропного потенциала взаимодействия.

В общем случае 2D потенциал взаимодействия $U(\rho, \phi)$ зависит от угла ϕ , и как следствие от направления распространения падающей волны, которое определяется углом ϕ_q между относительным импульсом частиц \vec{q} и осью .

Варьирование направления падающей волны \mathbf{q}/q в 2D пространстве может быть заменено трансформацией потенциала взаимодействия $U(\rho, \phi) \rightarrow U(\rho, \phi + \phi_q)$ при фиксированном направлении падающей волны, которое выбирается нами совпадающим с осью X .

Дифференциальное сечение рассеяния в 2D определяется, как и в потенциальном рассеянии в трехмерном пространстве, амплитудой рассеяния $f(q, \phi, \phi_q)$:

$$d\sigma(q, \phi, \phi_q)/d\Omega = |f(q, \phi, \phi_q)|^2, \quad (2.3)$$

где $d\Omega = d\phi d\phi_q$, а полное сечение рассеяния

$$\sigma(q) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\phi_q d\phi \quad (2.4)$$

усреднением дифференциального сечения по всем возможным ориентациям ϕ_q падающей волны и интегрированием по углу рассеяния ϕ .

Для решения задачи (2.1) с гамильтонианом (2.2) и определения искомого амплитуды рассеяния и волновой функции нами применяется численный подход, аналогичный алгоритму, изложенному в главе 1. Основные отличия заключаются в использовании других граничных условий, описанных ниже, а также в способе трансформации получаемой системы дифференциальных уравнений к краевой задаче и её численном решении.

2.1.2. Граничные условия

Поскольку радиальные компоненты Ψ_j стремятся к нулю при $\rho \rightarrow 0$ (т.к. выражение $\Psi_j/\sqrt{\rho}$ должно быть конечным в точке $\rho = 0$), левое граничное условие для Ψ_j имеет вид

$$\Psi_j(0) = 0. \quad (2.5)$$

В асимптотической области $\rho \rightarrow \infty$ граничное условие (2.1) принимает вид:

$$\frac{1}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{2M} \sum_{m=-M}^M e^{im(\phi-\phi_j)} \psi_j(\rho) = \exp\{iq\rho \cos(\phi)\} + f(q, \phi, \phi_q) \frac{e^{iq\rho}}{\sqrt{-i\rho}}. \quad (2.6)$$

Используя Фурье разложения плоских волн $\exp\{iq\rho \cos(\phi)\}$ [33] и амплитуды рассеяния:

$$\exp\{iq\rho \cos(\phi)\} = \sum_{m'=-M}^M i^{m'} J_{m'}(q\rho) e^{im'\phi} \quad (2.7)$$

$$f(q, \phi, \phi_q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m'=-M}^M f_{m'}(\phi_q) e^{im'\phi}, \quad (2.8)$$

угловая зависимость исключается из выражения (2.6) и правое граничное условие для радиальных функций $\psi_j(\rho \rightarrow \infty)$ принимает вид:

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{2M} e^{-im\phi_j} \psi_j(\rho) = i^m J_m(q\rho) \sqrt{2\pi} + \frac{f_m(\phi_q)}{\sqrt{-i\rho}} e^{iq\rho}. \quad (2.9)$$

Конечно-разностная аппроксимация и решение получаемой алгебраической задачи описаны в Приложениях А и Б. Таким образом, исходная задача сводится к краевой матричной задаче.

2.1.3. Рассеяние на эллиптическом потенциальном барьере

В качестве примера рассмотрено применение вычислительной схемы к потенциальному барьеру с контуром основания $a(\phi)$:

$$U(\rho, \phi) = \begin{cases} U_0, & \rho \leq a(\phi) \\ 0, & \rho > a(\phi) \end{cases} \quad (2.10)$$

Случай барьера с круговым основанием $a(\phi) = a_0$ изучался в работах [33, 58, 103]. В низкоэнергетическом пределе $q \rightarrow 0$ для финитного изотропного потенциала существует параметризация амплитуды рассеяния [33, 58, 103]

$$f(q) \xrightarrow{q \rightarrow 0} -\sqrt{\frac{\pi}{2q}} \frac{1}{\ln \left[\frac{2}{a_{2D} q \exp(\gamma)} \right] + i\frac{\pi}{2}} \quad (2.11)$$

Таблица 2.1. Зависимость амплитуды рассеяния $f(q, \phi, \phi_q)$ от высоты потенциального барьера (1.12) с круговым основанием. Вычисления выполнены для $a_0 = 0.01$ при следующих параметрах: $M = 10^2$, $N = 10^5$, и $\rho_N = 15$.

U_0	$q = 0.125$		$q = 1$	
	$f(q, 0, 0)$	$f(q, \pi, 0)$	$f(q, 0, 0)$	$f(q, \pi, 0)$
10^4	$-0.42692 + i0.08772$	$-0.42693 + i0.08772$	$-0.19832 + i0.05304$	$-0.19837 + i0.05304$
10^5	$-0.47960 + i0.11141$	$-0.47961 + i0.11141$	$-0.22999 + i0.07362$	$-0.23016 + i0.07362$
10^6	$-0.49055 + i0.11674$	$-0.49056 + i0.11674$	$-0.23673 + i0.07853$	$-0.23696 + i0.07853$
10^8	$-0.49400 + i0.11846$	$-0.49402 + i0.11846$	$-0.23895 + i0.07988$	$-0.23920 + i0.07988$
10^{10}	$-0.49408 + i0.11850$	$-0.49409 + i0.11849$	$-0.23899 + i0.07992$	$-0.23925 + i0.07992$
Eq.(2.11)	$-0.49486 + i0.11430$	$-0.49486 + i0.11430$	$-0.23901 + i0.07952$	$-0.23901 + i0.07952$

через 2D длину рассеяния a_{2D} , где $\gamma \approx 0,5772\dots$ — константа Эйлера.

Для бесконечно высокого потенциального барьера (2.10) с круговым основанием $a(\phi) = a = \text{const}$ константа a_{2D} равна a [33]. Потенциал такого вида может быть аппроксимирован высоким конечным потенциальным барьером:

$$U(\rho, \phi) = \begin{cases} U_0, & \rho \leq a(\phi) \\ 0, & \rho > a(\phi) \end{cases} \quad (2.12)$$

с $U_0 \rightarrow \infty$, для которого были проведены вычисления в низкоэнергетическом пределе.

На рис.2.1 представлена амплитуда рассеяния, вычисленная для потенциала $U_0 = 10^4$ и $a(\phi) = a_0 = 1$. На рис.2.1(а, б) и рис.2.2 иллюстрируется согласие вычисленной амплитуды рассеяния и дифференциального сечения соответственно с аналитической оценкой (2.11) в низкоэнергетическом пределе.

Таблица 2.2. Зависимость амплитуды рассеяния $f(q, \phi, \phi_q)$ от числа точек сетки по угловой переменной для рассеивателя (2.12) с эллиптическим основанием. Расчеты выполнены для $q = 1.5$ при следующих параметрах: $U_0 = 10^3$, $N = 10^4$, и $\rho_N = 15$.

M	$a(\pi/2)/a(0) = 1.1$		$a(\pi/2)/a(0) = 2.0$	
	$f(q, 0, 0)$	$f(q, \pi, 0)$	$f(q, 0, 0)$	$f(q, \pi, 0)$
1	0.94212 - i0.36446	-0.33027 + i1.24225	-0.95099 - i0.52976	0.36649 + i1.04884
2	0.65275 - i0.30331	-0.61946 + i1.30336	-1.48979 + i0.79336	-0.50755 + i2.02677
3	0.68693 - i0.30254	-0.65392 + i1.30275	-0.31229 + i0.79336	-1.01013 + i1.68129
4	0.68794 - i0.30507	-0.65902 + i1.29149	-0.28629 + i0.18596	-0.90989 + i1.50458
5	0.68799 - i0.30506	-0.65940 + i1.29164	-0.50155 + i0.05523	-0.87486 + i1.52425
10			-0.60611 + i0.07641	-0.89428 + i1.53586
20			-0.61098 + i0.07836	-0.89552 + i1.53816
30			-0.61173 + i0.07971	-0.89572 + i1.53885

Для случая *анизотропной* границы барьера $a(\phi)$ рассчитанные дифференциальные сечения рассеяния $d\sigma/d\Omega$ представлены на рис.2.3.

Рисунок 2.3 демонстрирует слабую зависимость дифференциальных сечений от угла рассеяния в низкоэнергетическом пределе для финитных потенциалов. Анизотропия потенциала взаимодействия порождает угловые особенности в дифференциальных сечениях: при определенных углах появляются ярко выраженные экстремумы.

2.1.4. Квантовое рассеяние двух поляризованных диполей

В этом разделе исследуется 2D квантовое рассеяние на дальнедействующем анизотропном рассеивателе, определяемом диполь-дипольным взаимодействием. Изучаемая модель описывает, например, столкновения полярных молекул в двумерной геометрии одномерных оптических ловушек. Потенциал взаи-

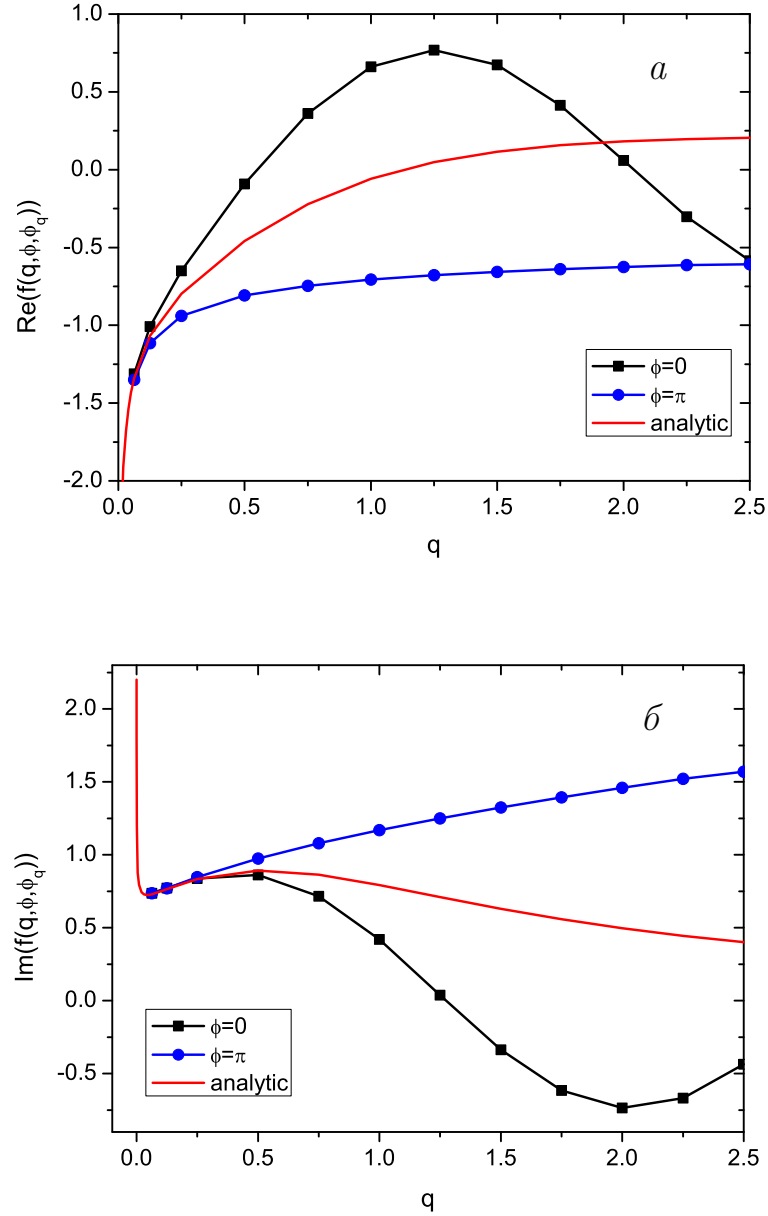


Рис. 2.1. Зависимость реальной (а) и мнимой (б) части амплитуды рассеяния от относительного импульса q для потенциального барьера (2.12) с круговым основанием $a(\phi) = a_0 = 1$ и $U_0 = 10^4$. Вычисления выполнены для $\phi_q = 0$ при следующих значениях параметров: $M = 10^2$, $N = 10^5$ и $\rho_N = 15$. Величины f и q приведены в единицах $\hbar = \mu = 1$.

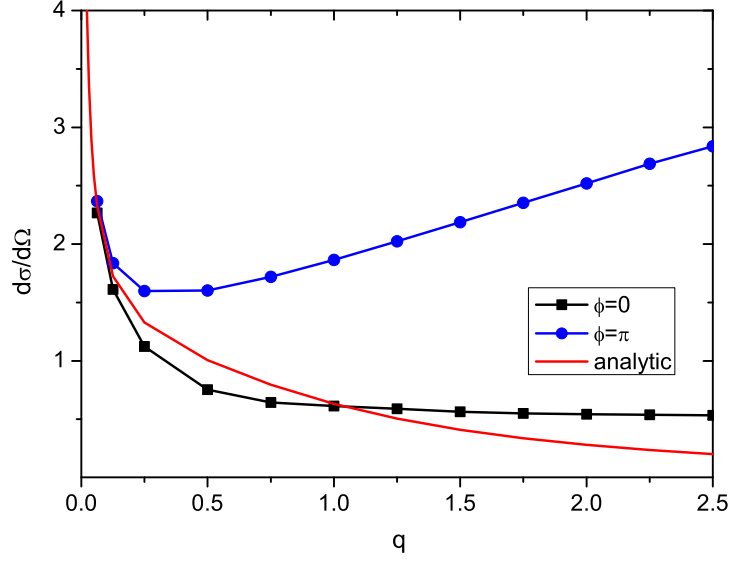


Рис. 2.2. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от относительного импульса q для потенциального барьера (2.12) с круговым основанием $a(\phi) = a_0 = 1$ и $U_0 = 10^4$. Вычисления выполнены для $\phi_q = 0$ при следующих значениях параметров: $M = 10^2$, $N = 10^5$ и $\rho_N = 15$. Величины $d\sigma/d\Omega$ и q приведены в единицах $\hbar = \mu = 1$.

модействия двух произвольно направленных диполей имеет вид

$$U(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2) = \frac{1}{\rho^3} \left((\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2) - 3 \frac{(\mathbf{d}_1 \boldsymbol{\rho})(\mathbf{d}_2 \boldsymbol{\rho})}{\rho^2} \right), \quad (2.13)$$

где \mathbf{d}_i , ($i = 1, 2$) – дипольные моменты и $(\mathbf{d}_i \boldsymbol{\rho})/\rho$ – их проекции на линию, соединяющую центры диполей. В полярных координатах выражение (2.13) записывается в виде

$$U(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - 3 \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\phi) \cos(\phi - \beta)], \quad (2.14)$$

где углы α и γ определяют наклон диполей относительно оси Z , перпендикулярной плоскости рассеяния, а угол β обозначает пространственную ориентацию плоскостей поляризации диполей Zd_1 и Zd_2 на рис. 2.4.

Для случая поляризации сталкивающихся молекул, ортогональной плоскости движения ($\alpha = \beta = \gamma = 0$), интенсивно исследовавшегося в работах других

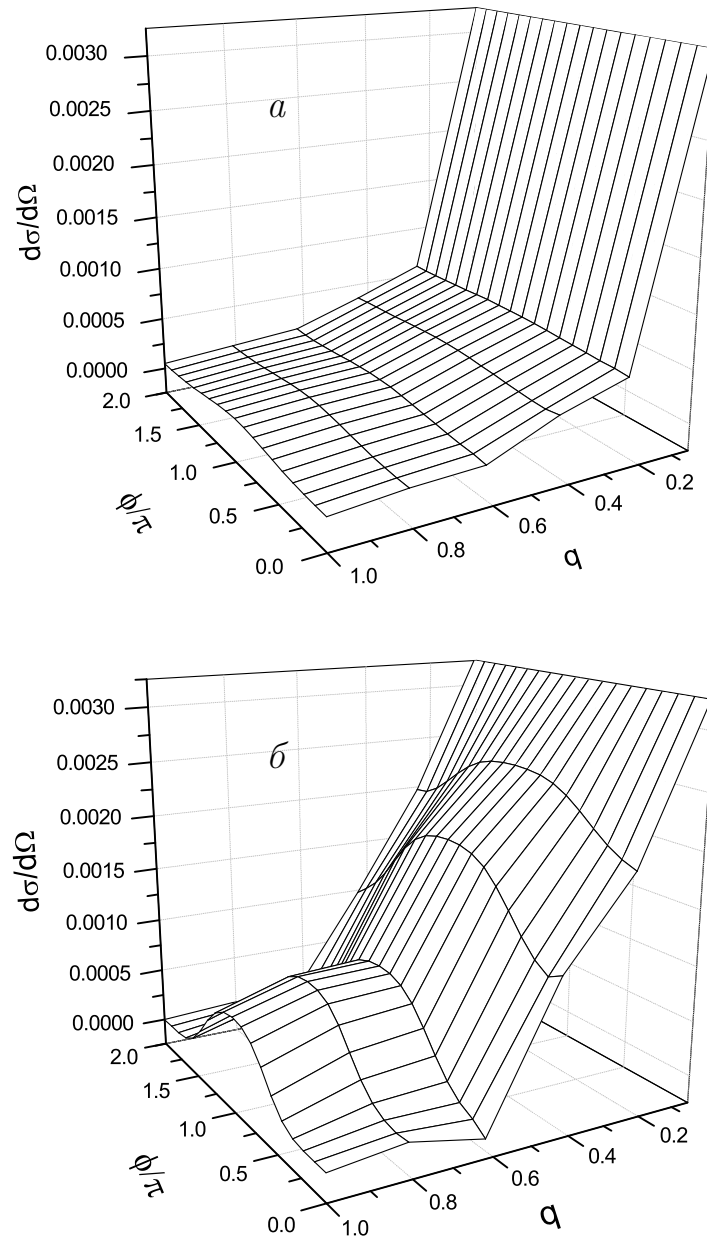


Рис. 2.3. Зависимость дифференциального сечения рассеяния от угла рассеяния ϕ и относительного импульса q для $\phi_q = 0$ в случае потенциального барьера $U_0 = 1000$ с круговым основанием $a(\phi) = a_0 = 1$ (а) и в случае сильно анизотропного потенциального барьера $U_0 = 1000$ с эллиптическим основанием $a(\pi/2) = 2$ и $a(0) = 1$ (б). Величины $d\sigma/d\Omega$ и q приведены в единицах $\hbar = \mu = 1$.

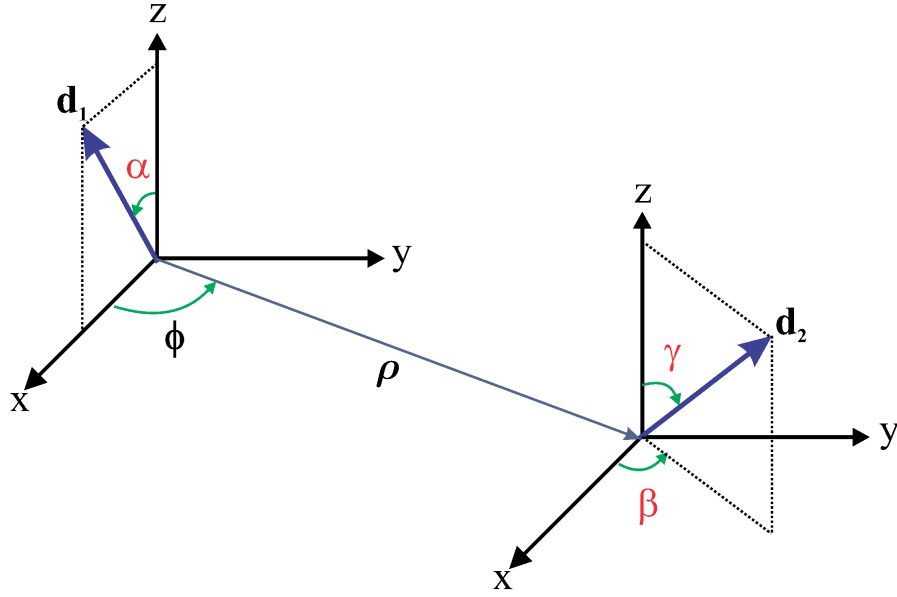


Рис. 2.4. Столкновение в плоскости XY двух произвольно ориентированных диполей \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2

авторов [54, 55], взаимодействие является полностью изотропным и отталкивательным:

$$U(\rho) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3}. \quad (2.15)$$

Для диполей ориентированных в плоскости ($\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2}$) потенциал взаимодействия становится анизотропным и принимает следующий вид

$$U(\rho, \phi, \beta) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\cos(\beta) - 3 \cos(\phi) \cos(\phi - \beta)]. \quad (2.16)$$

Частный случай, когда оси поляризации двух диполей сонаправлены и угол наклона к оси Z равен α ($\alpha = \gamma; \beta = 0$) а короткодействующее взаимодействие моделируется потенциалом бесконечно высокого барьера в нуле

$$V_{HW}(\rho) = \begin{cases} \infty, & \rho \leq \rho_{HW} \\ 0, & \rho > \rho_{HW} \end{cases} \quad (2.17)$$

шириной $\rho_{HW}/D = 0.1$

$$U(\rho, \phi, \alpha) = V_{HW}(\rho) + \frac{d^2}{\rho^3} [1 - 3 \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi)] \quad (2.18)$$

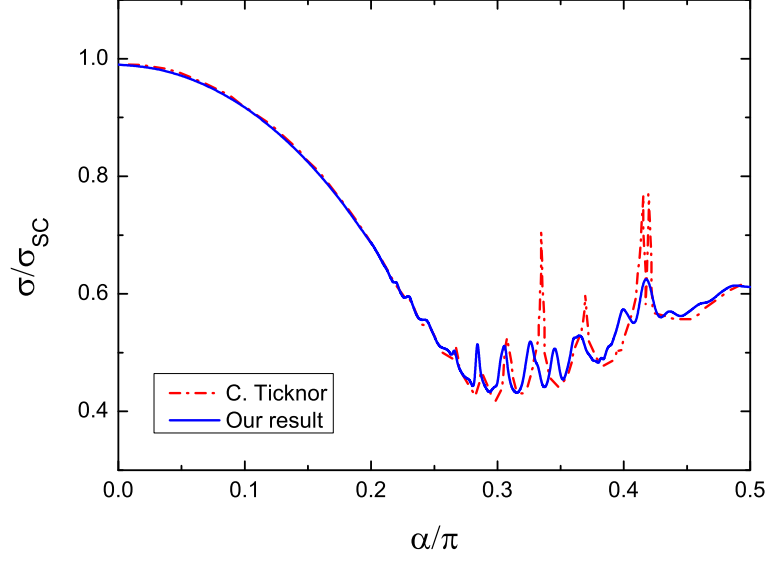


Рис. 2.5. Сравнение полного сечения рассеяния (в единицах σ_{SC}) с результатами работы С. Ticknor [44], вычисленного для потенциала (2.18) при $D = 1$, $Dq = 10$.

рассмотрен в работе [44]. Нами также изучена подобная конфигурация диполей с помощью разработанного подхода и получено хорошее согласие с результатами работы [44], что проиллюстрировано на рис. 2.5, где рассчитанное полное сечение рассеяния $\sigma(q, \alpha)$ (2.4) представлено в единицах σ_{SC} . Дипольная длина $D = \mu d^2 / \hbar^2$ ($d = d_1 = d_2$) и значение полного сечения рассеяния в приближении эйконала $\sigma_{SC} = \frac{4}{q} \sqrt{\pi D q}$, справедливом в высокоэнергетическом пределе $Dq \gg 1$ [44], обозначены D и σ_{SC} соответственно. Все вычисления в этой главе произведены при следующих параметрах расчетов: количество точек сетки по угловой переменной $M = 40$, количество точек сетки по радиальной переменной $N = 1.2 \times 10^5$, правая граница сетки по радиальной переменной $\rho_N = 60$; число точек сетки по ϕ_q равно $2M_q + 1 = 101$.

Материалы и результаты, представленные в разделе 2.1, опубликованы в работах [A1, A4].

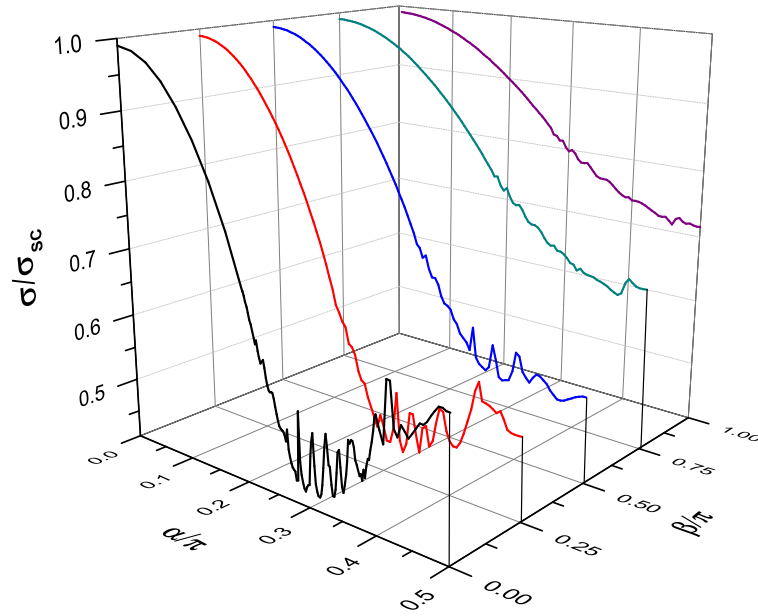


Рис. 2.6. Полное сечение рассеяния σ в единицах σ_{SC} как функция угла наклона $\alpha = \gamma$ диполей относительно оси Z и угла вращения β , вычисленное для потенциала (2.14) при $D = 1, Dq = 10$.

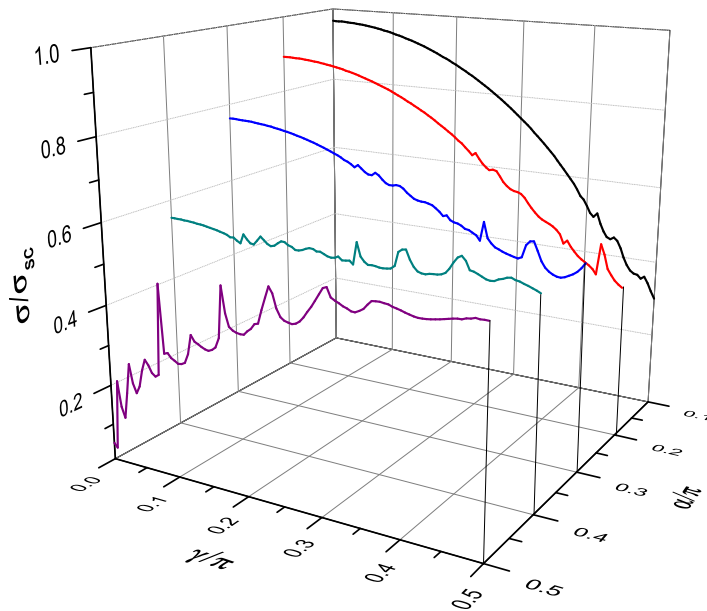


Рис. 2.7. Полное сечение рассеяния σ в единицах σ_{SC} как функция угла наклона α и γ , вычисленное для потенциала (2.14) при $D = 1, Dq = 10$. Угол вращения β фиксирован и равен $\pi/2$.

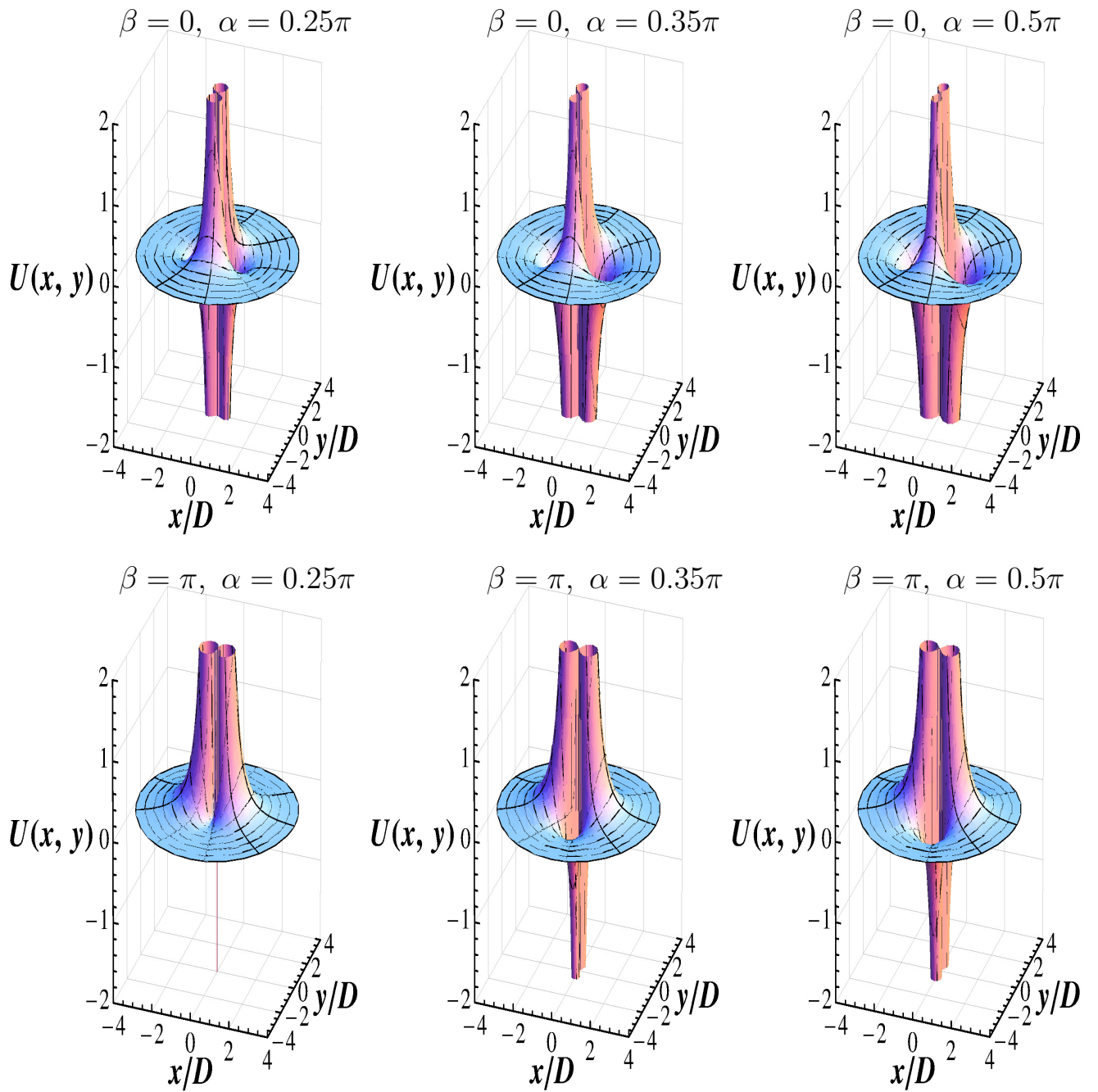


Рис. 2.8. Зависимости диполь-дипольного потенциала $U(\rho, \mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2)$ (2.14) в единицах $E_D = \hbar^6/\mu^3 d^4$ ($d = d_1 = d_2$) от угла наклона α для двух предельных взаимных ориентаций $\beta = 0$ и $\beta = \pi$ плоскостей поляризации диполей Zd_1 и Zd_2 .

2.2. Рассеяние двух неполяризованных диполей в плоскости

В данном разделе представлен анализ изменения найденной резонансной структуры для поляризованных диполей (см. рис. 2.5) в вычисленной зависимости сечения рассеяния от угла наклона диполей $\alpha = \gamma$ по мере нарушения сонаправленности диполей (деполяризации диполей) (см. [A1]). Деполяризация диполей моделируется вращением угла β между плоскостями поляризации диполей Zd_1 и Zd_2 (см. рис. 2.4). Нами обнаружено постепенное сужение резонансной области с одновременным уменьшением амплитуды резонансных осцилляций при увеличении угла β от 0 до π (см рис. 2.6).

При приближении к точке $\beta = \pi$ резонансная структура исчезает, зависимость сечение рассеяния от угла α становится гладкой и достигает его максимального значения. Этот эффект возникает благодаря тому, что по мере приближения к углу $\beta = \pi$ отталкивательная часть диполь-дипольного взаимодействия становится доминирующей (см. рис. 2.8). С уменьшением угла β от π до 0 для некоторых областей значений координат ρ и ϕ возникает притягательная часть потенциала $U(\rho, \phi) < 0$. Она приводит к появлению резонансов в сечении рассеяния.

Отметим, что представленные сечения рассеяния получены для случая различимых частиц (например, столкновений двух разных полярных молекул). Эффект симметризации или антисимметризации $f_{g,u}(\phi) = [f(\phi) \pm f(\phi - \pi)]/\sqrt{2}$ (то есть переход к идентичным частицам) проиллюстрирован на рис. 2.9 для $\alpha = 0.2\pi$ и β , изменяемом от 0 до 2π , где мы наблюдаем сильную зависимость полного сечения рассеяния от угла β с достижением максимума при $\beta = \pi$. Сечения рассеяния являются симметричными относительно этой точки ($\beta = \pi$). Отметим, что кривые $\sigma_g(\beta)$ и $\sigma_u(\beta)$, описывающие рассеяние бозонов и фермионов точно повторяют поведение кривой $\sigma(\beta)$ для случая различимых частиц.

Нами проанализировано рассеяние произвольно ориентированных дипо-

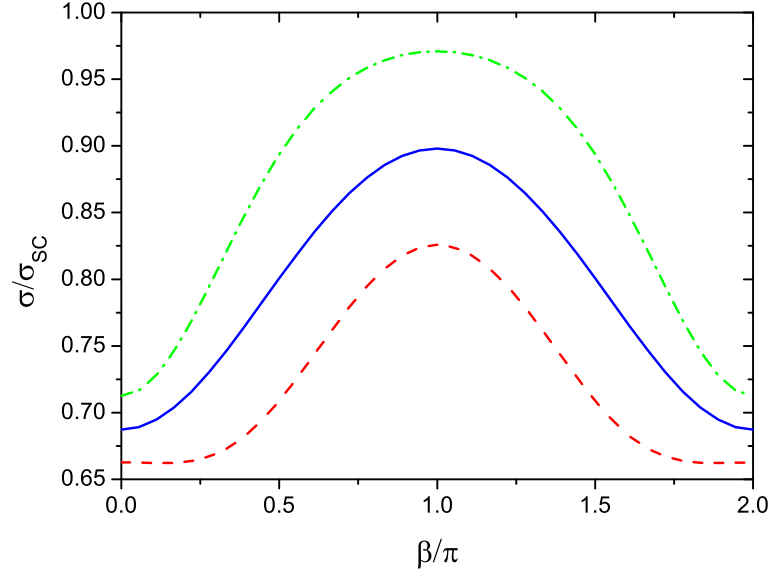


Рис. 2.9. Полное сечение рассеяния σ (сплошная синяя линия), сечение рассеяния бозонов σ_g (штриховая красная линия), сечение рассеяния фермионов σ_u (штрих-пунктирная зеленая линия), вычисленные для потенциала (2.14) как функции угла β для фиксированных значений $\alpha = \gamma = 0.2\pi$ при $D = 1, Dq = 10$ (в единицах σ_{SC}).

лей в случае взаимной ортогональности их плоскостей поляризации Zd_1 и Zd_2 ($\beta = \pi/2$). Здесь нами также обнаружен ярко выраженный резонансный характер рассеяния при изменении угла наклона γ одного из диполей, если другой диполь ориентирован в плоскости рассеяния XY ($\alpha = \beta = \pi/2$) (см. рис. 2.7), который возникает из-за усиления части диполь-дипольного взаимодействия, ответственной за притяжение, при увеличении угла наклона $\alpha \rightarrow \pi/2$.

Сходящиеся результаты получены даже в областях резонансного рассеяния как поляризованных, так и неполяризованных диполей (см. рис. 2.6 и 2.7). Небольшие смещения положений резонансов в рассеянии поляризованных диполей вычисленные с помощью нашего метода относительно значений, полученных Тикнором (см. рис. 2.6) может быть объяснено ошибками "усечения" ряда его разложения по парциальным волнам.

Как отмечено в главе 1, матрица потенциала в нашем представлении является диагональной и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной в случае отсутствия в потенциале операторов дифференцирования

и интегрирования по угловой переменной, что позволило нам провести детальные расчеты 2D диполь-дипольного рассеяния для различных взаимных расположений диполей и также представляет алгоритм достаточно эффективным в случае несепарабельных взаимодействий и обобщений на задачи с большим количеством независимых переменных.

2.3. Основные выводы

Разработана вычислительная схема для количественного анализа двумерного квантового рассеяния на дальнедействующих анизотропных потенциалах. Высокая эффективность метода продемонстрирована на анализе рассеяния на эллиптическом потенциальном барьере и диполь-дипольных столкновениях в плоскости. Для этого случая нами обнаружена сильная зависимость сечения рассеяния от взаимной ориентации диполей.

Метод может быть применен для анализа столкновительной динамики как поляризованных, так и неполяризованных полярных молекул в 2D и квази-2D геометрии.

Другое применение состоит в количественном анализе индуцированных конфайнментом резонансов в квази-2D геометрии. В данной задаче центральным элементом является учет конфайнмента по одному измерению, что является предметом для будущей работы с обобщением разработанного подхода на случай 3D пространства. В частности, этот анализ, возможно, разрешит интенсивно обсуждаемую проблему положения 2D индуцированных конфайнментом резонансов, экспериментально измеренных в работе [12].

Нами получено отличное согласие с результатами работ других авторов [44, 54] для 2D рассеяния поляризованных диполей, особенно в резонансной области (см. рис. 2.5), выполненных на основе принципиально других методов, основанных на применении формализма парциальных волн. Это является свидетельством успешной верификации используемого в нашей работе алгоритма без применения разложения по парциальным волнам, изложенного в разделе 2.1. Продемонстрирована высокая эффективность метода на анализе диполь-дипольных столкновений в плоскости.

Рассмотрено влияние нарушения сонаправленности (деполяризации) диполей на характеристики 2D рассеяния. Проанализировано изменение полученной для рассеяния поляризованных диполей резонансной структуры в полученной

нами зависимости сечения рассеяния от угла наклона диполей $\alpha = \gamma$ с изменением угла β .

Обнаружено постепенное сужение резонансной области с одновременным уменьшением амплитуды резонансных осцилляций при увеличении угла β от 0 до π . При приближении к точке $\beta = \pi$ резонансная структура исчезает, зависимость сечения рассеяния от угла α становится гладкой и достигает его максимального значения.

При переходе к идентичным частицам (бозонам или фермионам) выявлена сильная зависимость полного сечения рассеяния от угла β с достижением максимума при $\beta = \pi$, проиллюстрированная на рис. 2.9 для $\alpha = 0.2\pi$ и β , изменяемом от 0 до 2π . Сечения рассеяния являются симметричными относительно этой точки ($\beta = \pi$).

Отметим, что кривые, описывающие рассеяние бозонов и фермионов точно повторяют поведение кривой для случая различимых частиц. Отметим, что достигнутые в работе результаты для сечения рассеяния получены как для случая различимых частиц, так и для случая идентичных частиц (бозонов и фермионов).

Нами найден ярко выраженный резонансный характер зависимости рассеяния произвольно ориентированных диполей в случае взаимной ортогональности их плоскостей поляризации Zd_1 и Zd_2 ($\beta = \pi/2$).

Представленные в разделе 2.2 результаты опубликованы в работах [A1, A8].

Глава 3

Анизотропные особенности 2D атома водорода и экситона во внешнем произвольно направленном магнитном поле

Целью данной работы является численное исследование анизотропных свойств 2D атома водорода в магнитном поле. В отличие от выполненных ранее работ [4, 5, 73—76] мы изучаем зависимости спектра и волновых функций исследуемой системы от произвольных направлений магнитного поля, составляющих угол α с нормалью к плоскости движения электрона (см. рис. 3.1).

Отметим, что хотя электрон в 2D атоме водорода движется в плоскости, электромагнитные поля, угловой момент и другие величины не ограничены расположением в плоскости.

Целью работы также является исследование влияния наклона магнитного поля на энергию основного состояния (ЭОС) 2D экситонов в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As при различных величинах магнитного поля, доступных на современных лабораторных экспериментальных установках.

Для дискретизации матрицы гамильтониана нами применяется разложение волновой функции на основе метода дискретной переменной [A1, 92], семиточечная конечно-разностная аппроксимация, а для решения задачи на собственные значения — метод обратных итераций [95], на каждой итерации которого матричное уравнение решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [96].

В разделе 3.1 рассмотрено обобщение проблемы связанных состояний 2D атома водорода в магнитном поле на случай магнитного поля, направленного под углом α к нормали к плоскости движения электрона и описан алгоритм для ее численного решения. В разделе 3.1.1 приведена формулировка проблемы

связанных состояний 2D атома водорода и 2D экситона в наклонном магнитном поле, получено согласие с результатами работ других авторов для двумерного атома водорода для магнитного поля, направленного перпендикулярно к плоскости движения частиц. Исследование анизотропных свойств энергетического спектра 2D атома водорода и 2D экситона для произвольно направленного магнитного поля представлено в разделе 3.2. В разделе 3.3 сформулированы основные выводы.

3.1. Проблема связанных состояний 2D атома водорода во внешнем магнитном поле в приближении Борна-Оппенгеймера и с учетом конечной массы протона

Гамильтониан 2D атома водорода в однородном магнитном поле \mathbf{B} в полярных координатах $\boldsymbol{\rho} = (\rho, \phi)$ имеет вид¹ [4]:

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{P} - 2\mathbf{A}_\rho)^2}{2(m_p + m_e)} + \frac{(\mathbf{p} - (\mu_e - \mu_p)\mathbf{A}_\rho)^2}{2m_r} - \frac{1}{\rho}, \quad (3.1)$$

где m_p — масса протона, m_e — масса электрона (соответствующие приведенные массы — $\mu_p = \frac{m_p}{m_p + m_e}$, $\mu_e = \frac{m_e}{m_p + m_e}$), \mathbf{P} — полный, а \mathbf{p} — относительный импульсы системы; $m_r = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$ — приведенная масса системы. Используется симметричная калибровка вектор потенциала $\mathbf{A}_\rho = \frac{1}{2} [\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho}]$, где $\boldsymbol{\rho}$ — относительная координата.

Систему координат выберем из соображений удобства и наличия аксиальной симметрии в 2D атоме водорода: плоскость XY совпадает с плоскостью движения электрона, а индукция магнитного поля $\mathbf{B} = B \sin(\alpha)\mathbf{i} + B \cos(\alpha)\mathbf{k}$ лежит в плоскости XZ (см. рис. 3.1).

Аналогично работе [4] рассмотрена система, находящаяся в покое ($\mathbf{P} = 0$): в этом случае движение центра масс в выражении (3.1) отделяется от относительного движения. Используя представление волновой функции в виде:

$$\Psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) = e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}} \Psi(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.2)$$

где \mathbf{R} — координата центра масс, получим гамильтониан относительного движения:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2 + 2(\mu_p - \mu_e)(\mathbf{A}_\rho \cdot \mathbf{p}) + \mathbf{A}_\rho^2}{2m_r} - \frac{1}{\rho}. \quad (3.3)$$

¹ Все величины в главе приведены в атомных единицах (а.е.): $\hbar = m_e = e = 1$.

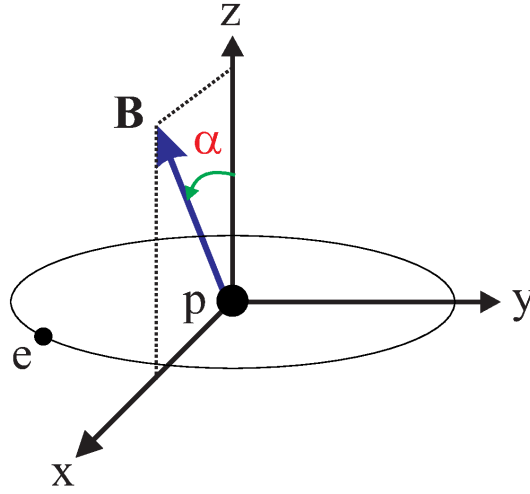


Рис. 3.1. Схематическое представление 2D атома водорода во внешнем магнитном поле, направленном под углом α к нормали к плоскости движения электрона.

В выражении (3.3) двумерный оператор кинетической энергии

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m_r} = -\frac{1}{2m_r} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} h^{(0)}(\phi) \right) \quad (3.4)$$

содержит угловую часть, имеющую простой вид в полярных координатах $h^{(0)}(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$. Линейное

$$(\mathbf{A}_\rho \cdot \mathbf{p}) = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}) = \frac{1}{2}B \cos(\alpha)L_z \quad (3.5)$$

и квадратичное по полю

$$\mathbf{A}_\rho^2 = \frac{1}{4}B^2 \rho^2 (1 - \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi)) \quad (3.6)$$

слагаемые учитываются в предельном переходе от 3D к 2D случаю (см. [11]).

В случае $\alpha = 0^\circ$ магнитное квантовое число l определяется проекцией углового момента $L_z = l$.

В представлении (1.3) уравнение Шредингера (1.1) с гамильтонианом (3.3) для относительного движения преобразуется в систему $2M + 1$ связанных дифференциальных уравнений второго порядка (1.5), а матрица потенциала для

эффективного потенциала взаимодействия гамильтониана (3.3) имеет вид:

$$V_{jj'}(\rho) = -\frac{2m_r}{\rho}\delta_{jj'} + (\mu_p - \mu_e)B \cos(\alpha)h_{jj'}^{(1)} + \frac{1}{4}B^2\rho^2 (1 - \sin^2(\alpha) \cos^2(\phi_j)) \delta_{jj'}, \quad (3.7)$$

а недиагональная матрица оператора $h^{(1)} \equiv L_z$ определяются соотношением:

$$h_{jj'}^{(1)} = \sum_{j''=-M}^M j'' \xi_{jj''} \xi_{j''j'}^{-1}. \quad (3.8)$$

Для решения задачи на собственные значения (1.5),(1.8),(1.9) с матрицей потенциала (3.7) вводится неравномерная сетка (по аналогии с квазиравномерными сетками [93]) по радиальной переменной ρ : $\rho_j = \rho_N t_j^2$, ($j = 1, 2, \dots, N$), узлы на которой определяются отображением $\rho_j \in [0, \rho_N \rightarrow \infty]$ на равномерную сетку $t_j \in [0, 1]$.

Для дискретизации используется конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности. Собственные значения получаемой матрицы гамильтониана определяются численно с помощью метода обратных итераций со сдвигом.

Возникающая на каждой итерации алгебраическая задача решается с помощью матричной модификации алгоритма прогонки [96] для блок-диагональной матрицы. (см. Приложения А и Б).

3.1.1. Приближение Борна-Оппенгеймера

Первоначально для решения поставленной задачи мы применили приближение Борна-Оппенгеймера, использованное в работах [62–65, 67–69, 73, 74], которое предполагает, что электрон движется в поле положительно заряженного неподвижного центра.

С целью верификации применяемого численного алгоритма проведено исследование проблемы связанных состояний 2D атома водорода в *отсутствии внешних полей* в приближении $m_p \rightarrow \infty$, имеющей аналитическое решение [62–

Таблица 3.1. Численно рассчитанные значения энергии двумерного атома водорода для n -го уровня E_n в отсутствии внешних полей и аналитические значения E работы [65] .

n	E , а.е. [65]	E_n , а.е.
1	-2.00000000	-2.00000000
2	-0.22222222	-0.22222222
3	-0.08000000	-0.08000000
4	-0.04081632	-0.04081633
5	-0.02469136	-0.02469136
6	-0.01652892	-0.01652892
7	-0.01183432	-0.01183432
8	-0.00888889	-0.00888889
9	-0.00692042	-0.00692042
10	-0.00554017	-0.00554016

65]. В табл. 3.1 продемонстрировано полное согласие первых десяти уровней энергии 2D атома водорода, рассчитанных численно с помощью приведенного выше алгоритма, с аналитическими значениями [65]. В табл. 3.2 представлено сравнение вычисленных дипольных матричных элементов с полученными аналитически в работе [65].

Приведенный в главе 3.1 алгоритм применен для расчетов энергии основного возбужденных состояний состояния 2D атома водорода *в магнитном поле, направленном перпендикулярно к плоскости движения электрона.*

Полученные в ходе численных расчетов значения ЭОС, вычисленные нами в приближении бесконечной массы протона, и полученные другими авторами с помощью метода асимптотических итераций [74] и вариационного подхода [4] при различных величинах магнитного поля представлены в табл. 3.3. Получен-

Таблица 3.2. Сравнение дипольных матричных элементов d_{nl} , вычисленных нами численно для 2D атома водорода в отсутствии внешних полей и полученных аналитически в работе [65].

n	l	d_{nl} , а.е. [65]	d_{nl} , а.е.
2	1	0.34445950	0.34445950
3	1	0.14087514	0.14087514
4	1	0.08223128	0.08223128
5	1	0.05564053	0.05564053

Таблица 3.3. Значения ЭОС при различных величинах магнитного поля, полученные другими авторами с помощью метода асимптотических итераций [74] и вариационного подхода [4] в сравнении со значениями, вычисленные нами в приближении бесконечной массы протона.

B , а.е.	E , а.е. [74]	E , а.е. [4]	E , а.е.
0.1	-1.999530	-1.999531	-1.999531
0.25	-1.997078	-1.997079	-1.997079
107/250	-1.991490	-1.991490	-1.991491
1	-1.955159	-1.955159	-1.955159

Таблица 3.4. Сравнение вычисленных нами значений уровней энергии в пределе $m_p \rightarrow \infty$ и результатов работ [74, 75] для магнитного квантового числа $l = 0$.

n	B , а.е.	E_n , а.е. [75]	E_n , а.е. [74]	E_n , а.е.
2	4	4.000000	4.0000000	4.0000000
3	0.6666666	1.000000	1.0000000	1.0000000
4	0.2157031	0.431406	0.4314064	0.4314064
3	2.7472602	5.494520	5.4945207	5.4945207
5	0.0947113	0.236778	0.2367785	0.2367785
4	0.5150444	1.287610	1.2876109	1.2876109
6	0.0496114	0.148834	0.1488343	0.1488343
5	0.1776672	0.533000	0.5330020	0.5330021
4	2.1513889	6.454170	6.4541668	6.4541668
10	0.0088435	0.0442176	0.0442177	0.0442177

Таблица 3.5. То же, что и в табл. 3.4 для магнитного квантового числа $l = 1$.

n	B , а.е.	E_n , а.е. [75]	E_n , а.е. [74]	E_n , а.е.
2	1.3333333	2.6666700	2.6666667	2.6666667
3	0.2857142	0.7142860	0.7142857	0.7142857
4	0.1102572	0.3307720	0.3307717	0.3307717
3	1.0749278	3.2247800	3.2247835	3.2247835
5	0.0545241	0.1909910	0.1907883	0.1907883
4	0.2395487	0.8384210	0.8384207	0.8384207
6	0.0311049	0.1244200	0.1244197	0.1244197
5	0.0951651	0.3806600	0.3806606	0.3806606
4	0.9151684	3.6606800	3.6606737	3.6606737
7	0.0194448	0.0875018	0.0875018	0.0875018
10	0.0066281	0.0397691	0.0397691	0.0397691

ные результаты находятся в соответствии с результатами других авторов [4, 74]. Проведено сравнение со значениями уровней энергии для двух проекций углового момента работ [74, 75] при различных величинах магнитных полей, представленное в табл. 3.4 для магнитного квантового числа $l = 0$ и в табл. 3.5 — для $l = 1$.

Результаты, представленные в разделе 3.1, опубликованы в работах [A2, A7].

3.2. Анизотропные свойства энергетического спектра и волновых функций 2D атома водорода и 2D экситона в произвольно направленном магнитном поле

С целью более точного анализа влияния величины и направления магнитного поля на спектр исследуемой системы нами рассчитана зависимость энергии основного и первых двух возбужденных состояний 2D атома водорода от угла наклона α к оси Z направления магнитного поля и от величины магнитного поля с учетом конечной массы протона.

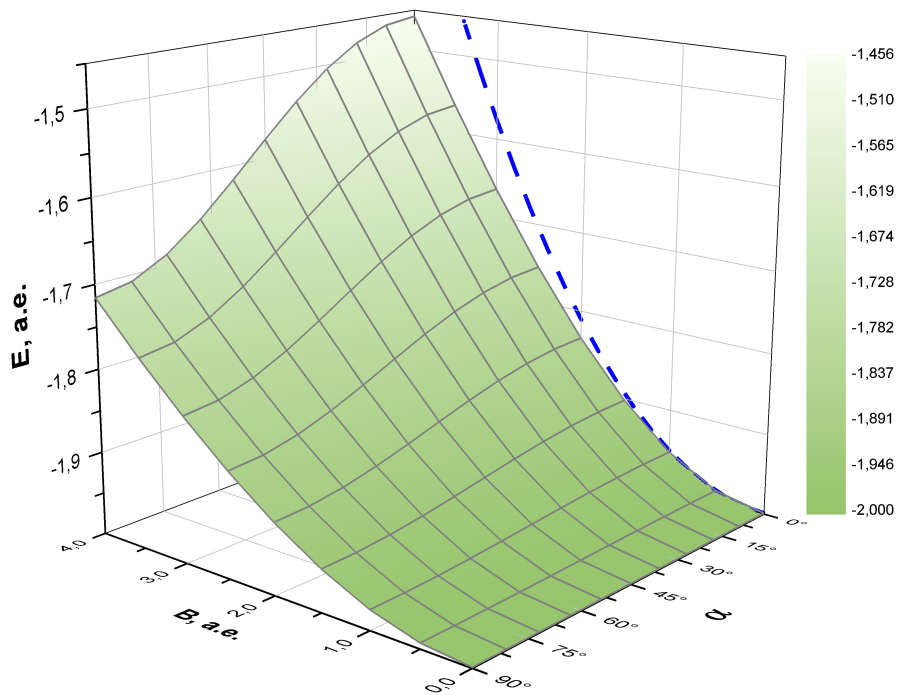


Рис. 3.2. Зависимость энергии основного состояния 2D атома водорода от величины магнитного поля и угла наклона α к оси z направления магнитного поля с учетом конечной массы протона. Пунктирной кривой обозначена зависимость ЭОС для слабых магнитных полей (3.9) [4], найденная по теории возмущений.

На рис. 3.2 найденная зависимость энергии основного состояния (ЭОС) иллюстрируется для диапазона полей от 0 до 4 а.е. ($1 \text{ а.е.} = 2.35 \cdot 10^5 \text{ Т}$) и на рис. 3.3 — для диапазона полей от 1 до 10^4 а.е.. Рисунок 3.2–3.3 иллюстрируют обнаруженный эффект нелинейного уменьшения ЭОС: при малых магнитных

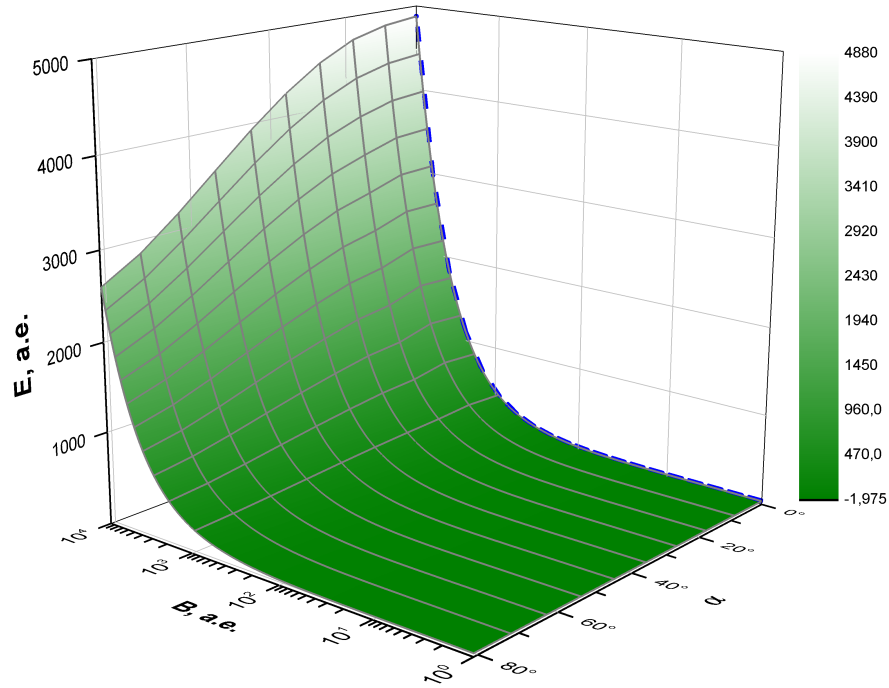


Рис. 3.3. То же, что и на рис. 3.2 для диапазона величины магнитного поля от 1 до 10^4 а.е.. Пунктирной кривой обозначена зависимость ЭОС для сильных магнитных полей (3.10) [4], найденная по теории возмущений.

полях изменение слабое, в области больших величин поля ЭОС уменьшается почти вдвое с изменением угла α от 0 до 90° .

Заметим, что найденная нелинейная зависимость не сводится к влиянию только лишь проекции B_z магнитного поля на нормаль к плоскости движения электрона, т.к. в этом случае для угла $\alpha = 90^\circ$, при котором $B_z = 0$, энергия основного состояния строго равнялась бы ЭОС 2D атома водорода в отсутствие магнитного поля, что опровергается представленными на рис. 3.2 результатами численного анализа.

С целью оценки влияния конечной массы протона на изменение ЭОС численно рассчитанные значения ЭОС для различных величин магнитного поля и углов наклона α в приближении $m_p \rightarrow \infty$ и с учетом конечной массы протона приведены в табл. 3.6. Отметим, что данные, посчитанные в обоих приближениях, отличаются в 3 знаке после запятой в широком диапазоне входных расчетных данных.

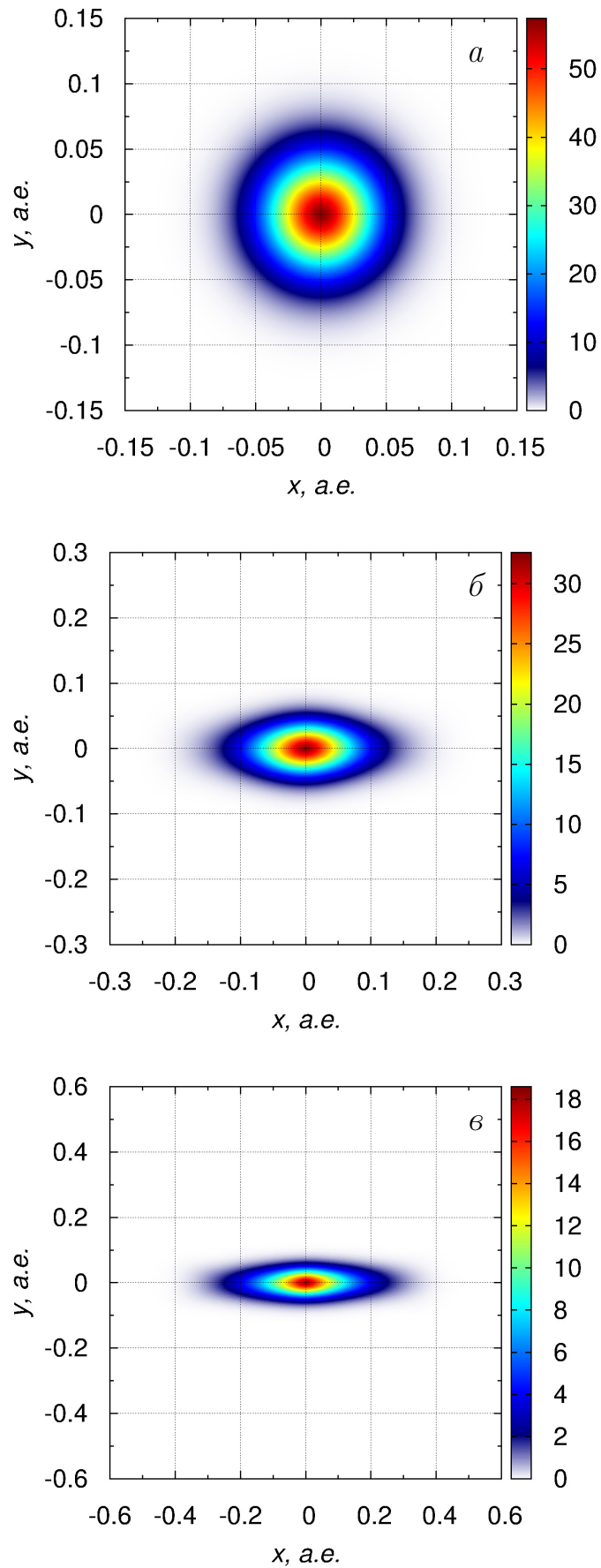


Рис. 3.4. Пространственное распределение $|\Psi(\rho)|^2$ волновой функции основного состояния двумерного атома водорода для магнитного поля $B = 10^3$ а.е. при различных значениях угла α : $\alpha = 0^\circ$ (а), $\alpha = 45^\circ$ (б), $\alpha = 80^\circ$ (в).

Таблица 3.6. Численно рассчитанные значения ЭОС для различных величин магнитного поля и углов наклона α в приближении $m_p \rightarrow \infty$ и с учетом конечной массы протона.

B , а.е.	α	$E(m_p \rightarrow \infty)$, а.е.	E , а.е.
0	0°	-2.00000000	-1.99891136
1	0°	-1.95515969	-1.95400154
1	45°	-1.96609353	-1.96495184
1	90°	-1.97736937	-1.97624499
1.5	0°	-1.90335296	-1.90212093
1.5	45°	-1.92643285	-1.92523340
1.5	90°	-1.95085064	-1.94968360
4	0°	-1.45958714	-1.45782964
4	45°	-1.57808514	-1.57646979
4	90°	-1.71786453	-1.71556932

Анализ полученных зависимостей рис. 3.2 и рис. 3.3 показывает, что для отличных от нуля углов α наблюдается более медленный рост значения ЭОС с увеличением магнитного поля, хотя квадратичная для слабых полей и линейная для сильных полей зависимости ЭОС от величины магнитного поля сохраняются. Значения ЭОС по теории возмущений для слабых

$$E = -2m_r + \frac{3}{64m_r^3}B^2 + \dots, \quad (3.9)$$

и сильных

$$E = \frac{B}{2m_r} - \sqrt{\frac{\pi}{2}}B + \dots \quad (3.10)$$

магнитных полей, найденные А. В. Турбинером в работе [4], представлены пунктирной кривой в плоскости $\alpha = 0^\circ$ на рис. 3.2 и рис. 3.3 соответственно.

Абсолютные значения энергий первых трех возбужденных состояний, вычисленные в настоящей работе для различных величин напряженности и углов наклона магнитного поля, приведены в таблицах 3.7–3.9. В таблицах 3.7–3.9

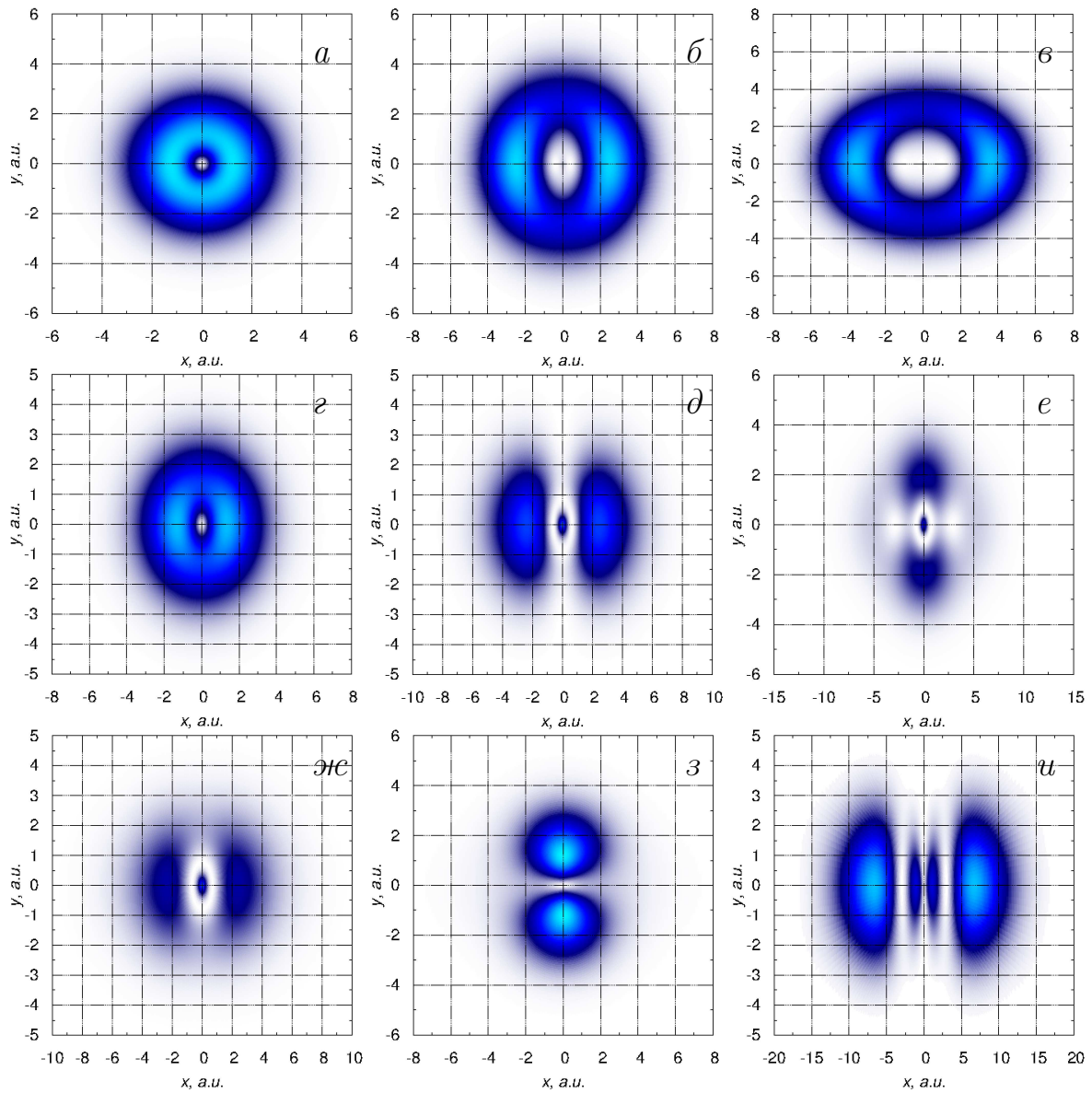


Рис. 3.5. График плотности пространственного распределения квадрата волновой функции $|\Psi(\rho, \phi)|^2$ первых трех ($n = 1, 2, 3$) возбужденных состояний двумерного атома водорода для магнитного поля $B = 0.5$ а.е. при углах наклона:

$\alpha = 27^\circ$ — $n = 1$ (а) $n = 2$ (б) $n = 3$ (в);

$\alpha = 54^\circ$ — $n = 1$ (г) $n = 2$ (д) $n = 3$ (е);

$\alpha = 81^\circ$ — $n = 1$ (ж) $n = 2$ (з) $n = 3$ (и);

(более светлые оттенки синего цвета означают более высокие плотности). Обратим внимание, что шкалы по осям X и Y различны.

демонстрируется, что энергии низколежащих возбужденных состояний с увеличением α нелинейно изменяются в 1.8 раза для первого и в 4.2 раза для третьего возбужденных состояний.

На рис. 3.7 приведены зависимости энергий первого (сплошная линия) и второго (штриховая линия) возбужденных состояний 2D атома водорода от угла наклона α для различных напряженностей магнитного поля $B = 0.5, 2.5$ и 5.0 а.е.. Из анализа рис. 3.7 следует, что увеличение величины напряженности магнитного поля приводит к изменению вида зависимости энергии первого возбужденного состояния (сплошная линия) от угла наклона α .

При $B < 3$ а.е. зависимость энергии возрастает, в то время как при $B = 5$ а.е. она нелинейно убывает. В то же время энергетическая зависимость второго возбужденного состояния всегда имеет максимум в этом диапазоне напряженности поля.

Пространственные распределения волновой функции (ПРВФ) низколежащих состояний с увеличением угла α становятся сильно анизотропными. Изменение ПРВФ основного состояния и первых трех возбужденных состояний для различных углов наклона α приведено на рис. 3.4 и рис. 3.5 соответственно.

Из-за анизотропии взаимодействия проекция оператора углового момента L_z не сохраняется и появляется выделенное направление вдоль проекции направления магнитного поля на атомную плоскость (совпадающую с осью X в выбранной системе координат). В частности, наблюдается вытянутость атомного состояния вдоль оси x при его одновременном сжатии вдоль оси y , проиллюстрированные на рис. 3.4 и рис. 3.5.

Наряду с убыванием ЭОС с увеличением угла α подобное поведение волновой функции может быть объяснено постепенным ослаблением «гармонического» вклада магнитного поля (3.6) вдоль оси X при $\alpha \rightarrow 90^\circ$, полностью исчезающим в случае $\alpha = 90^\circ$.

Соответствующее изменение потенциальной поверхности кулоновского и анизотропного квадратичного по полю (3.6) слагаемых

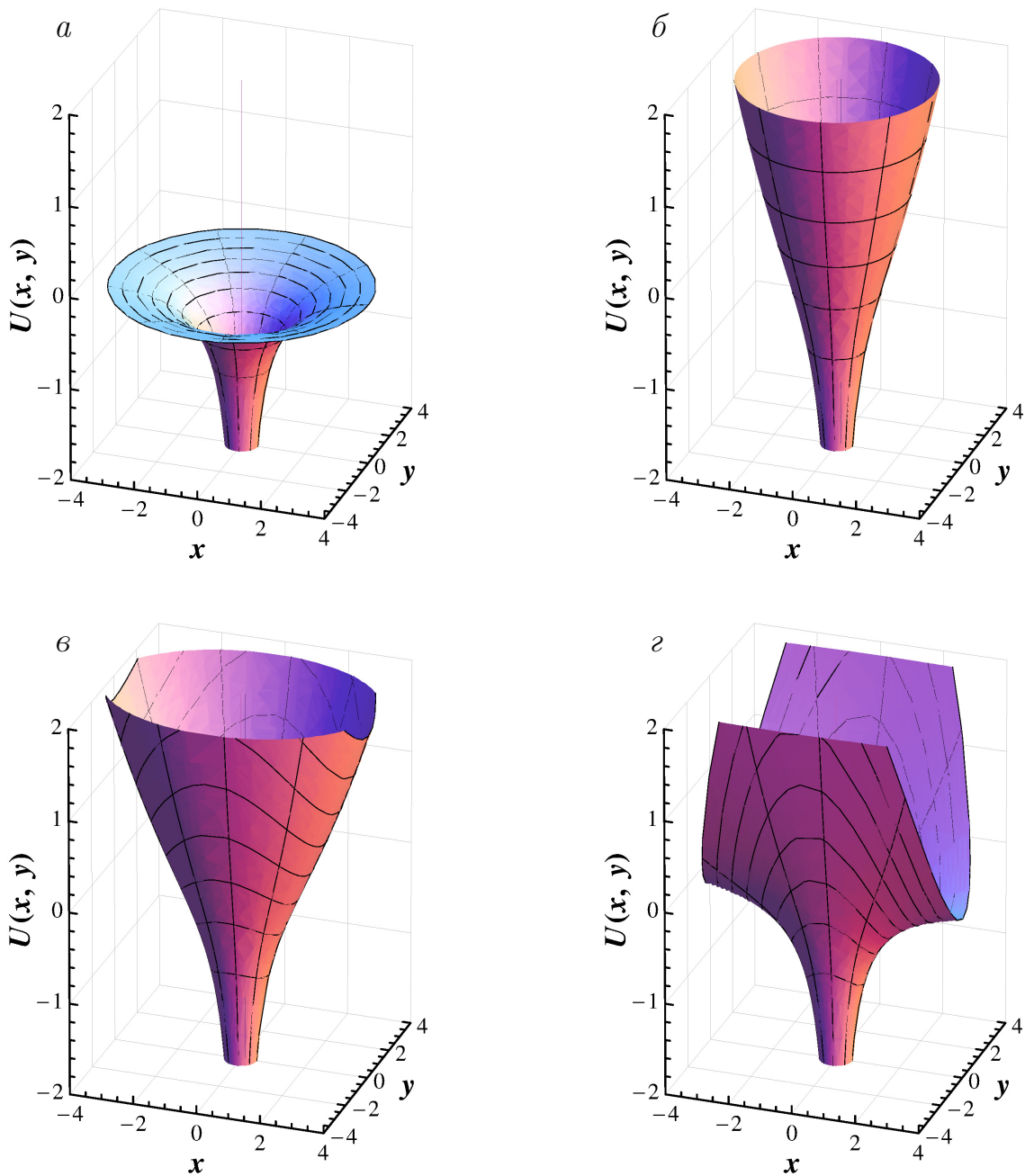


Рис. 3.6. Зависимость потенциала $U(\rho) = -1/\rho + B^2\rho^2(1 - \sin^2(\alpha)\cos^2(\phi))$ от угла α между направлением вектора индукции магнитного поля и осью z : для случая отсутствия магнитного поля (а), для магнитного поля $B = 0.5$ а.е. при различных значениях угла α : $\alpha = 0^\circ$ (б), $\alpha = 45^\circ$ (в), $\alpha = 90^\circ$ (г). Все величины на рисунке приведены в атомных единицах.

проиллюстрировано на рис. 3.6.

3.2.1. Двумерный экситон в магнитном поле

Следует отметить, что предложенный в настоящей работе подход применим для анализа спектра системы противоположно заряженных частиц, движущихся в плоскости в магнитном поле. Примером таких систем является экситон в двумерной квантовой яме GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As.

Для описания подобной системы в гамильтониане (3.3) мы изменили массы частиц на эффективные массы электрона $m_e^* = 0.067m_e$ и тяжелой дырки $m_h = 0.18m_e$ [104], добавив фактор $1/\epsilon$ (где $\epsilon = 12.1$ – константа диэлектрической проницаемости) в слагаемое кулоновского взаимодействия частиц:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2 + 2(\mu_h - \mu_e)(\mathbf{A}_\rho \cdot \mathbf{p}) + \mathbf{A}_\rho^2}{2m_r} - \frac{1}{\epsilon\rho}, \quad (3.11)$$

где $\mu_h = \frac{m_h}{m_h + m_e^*}$, $\mu_e = \frac{m_e^*}{m_h + m_e^*}$; $m_r = \frac{m_h m_e^*}{m_h + m_e^*}$.

Вычисленные при различных величинах магнитного поля (от 2 до 10 Тесла) зависимости энергии основного состояния экситона от угла наклона α , приведенные на рис.3.8, аналогичны по виду зависимостям для 2D атома водорода. Значения ЭОС для рассматриваемого в настоящей работе случая $P = 0$ для $\alpha = 0^\circ$ находятся в полном согласии со значениями работ [5, 105]. Благодаря уменьшению энергии основного состояния с увеличением угла наклона α , изменение направления магнитного поля может использоваться для изменения энергии связи 2D экситона в полупроводниковых гетероструктурах с эффективным движением электрона и дырки в плоскости.

Отметим, что в случае равенства эффективных масс электрона и дырки 2D экситона $m_h = m_e^*$, исследуемом в работе [106], линейное по полю слагаемое

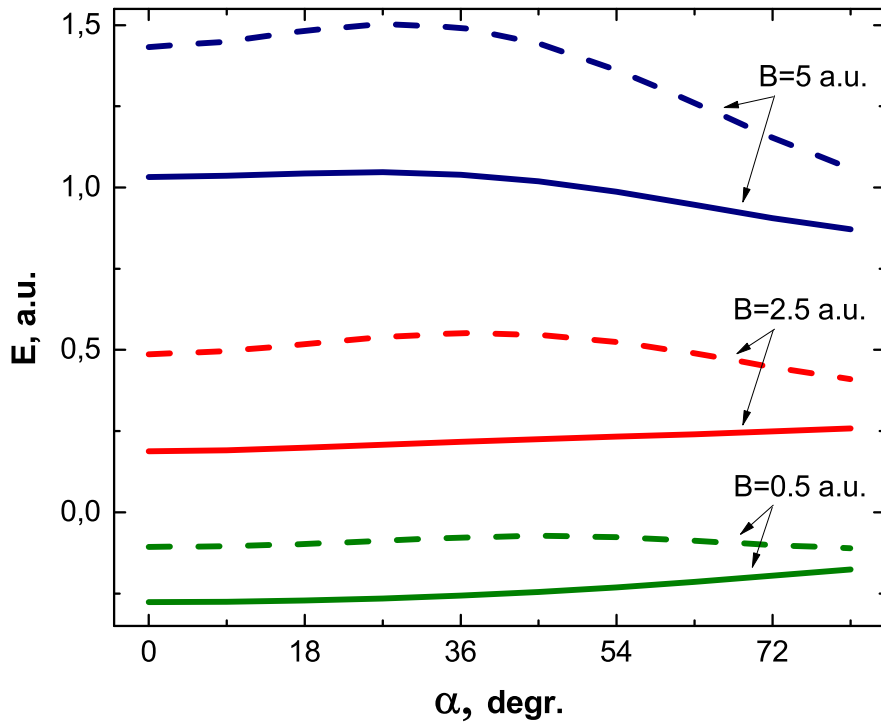


Рис. 3.7. Зависимости энергий первого (сплошная кривая) и второго (штриховая линия) возбужденных состояний 2D атома водорода от угла наклона α при различной величине магнитного поля ($B = 0.5, 2.5$ и 5.0 а.е.). $B = 0.5$ а.е. обозначено зеленой линией, $B = 2.5$ а.е. — красной линией, $B = 5.0$ а.е. — синей линией.

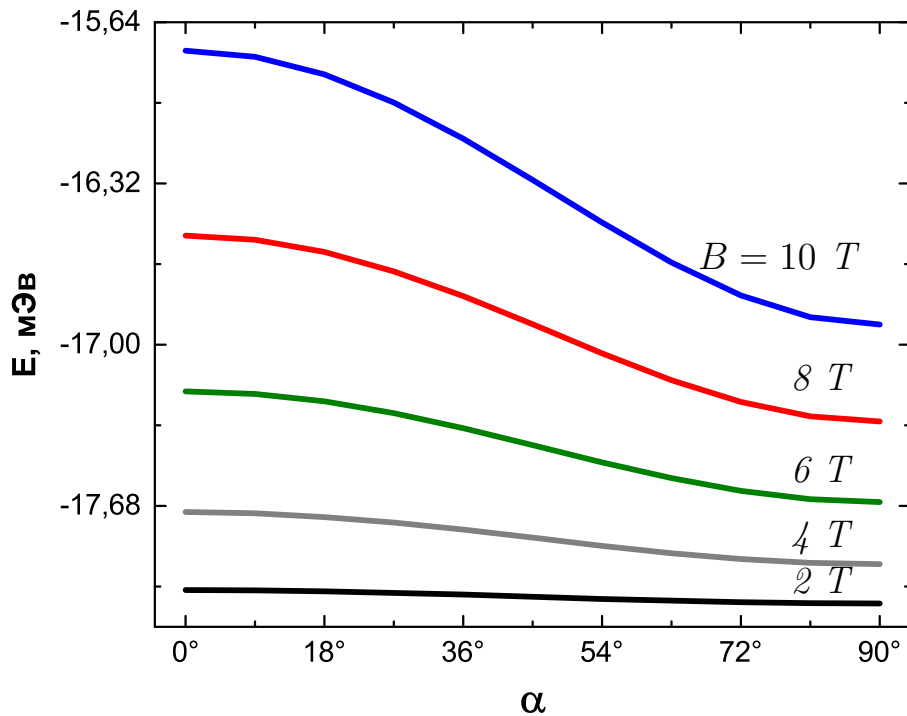


Рис. 3.8. Зависимость энергии основного состояния экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As от угла наклона α для величины магнитного поля B от 2 до 10 Т.

исчезает и гамильтониан имеет вид:

$$H = \frac{1}{2m_r} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \right. \\ \left. + \frac{1}{4}B^2 (x^2(1 - \sin^2(\alpha)) + y^2) \right] - \frac{1}{\epsilon\sqrt{x^2 + y^2}}. \quad (3.12)$$

Свойства гамильтониана (3.12) исследовались в рамках изучения спектров анизотропных двумерных квантовых точек в работе [107], где было обнаружено, что для определенных значений параметра анизотропии $(1 - \sin^2(\alpha))$ имеется дополнительный интеграл движения.

Существование дополнительной сохраняющейся величины приводит к значительным изменениям в структуре спектра, в частности, к восстановлению оболочечной структуры уровней, исчезающей при других значениях параметра анизотропии $(1 - \sin^2(\alpha))$. Таким образом, определенные углы наклона магнитного поля могут сильно менять спектральные характеристики 2D экситонов в материалах с близкими эффективными массами $m_h \approx m_e^*$.

Зависимости энергии для первого (сплошная линия) и второго (штриховая линия) возбужденных состояний экситона от угла наклона α при различных величинах напряженности магнитного поля ($B = 2, 4$ и 8 Т) представлены на рис. 3.9. Энергии первого и второго возбужденных состояний экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As монотонно убывают с увеличением угла наклона α в отличие от соответствующих энергий для 2D атома водорода.

Представленные в разделе 3.2 результаты опубликованы в работах [A2, A7].

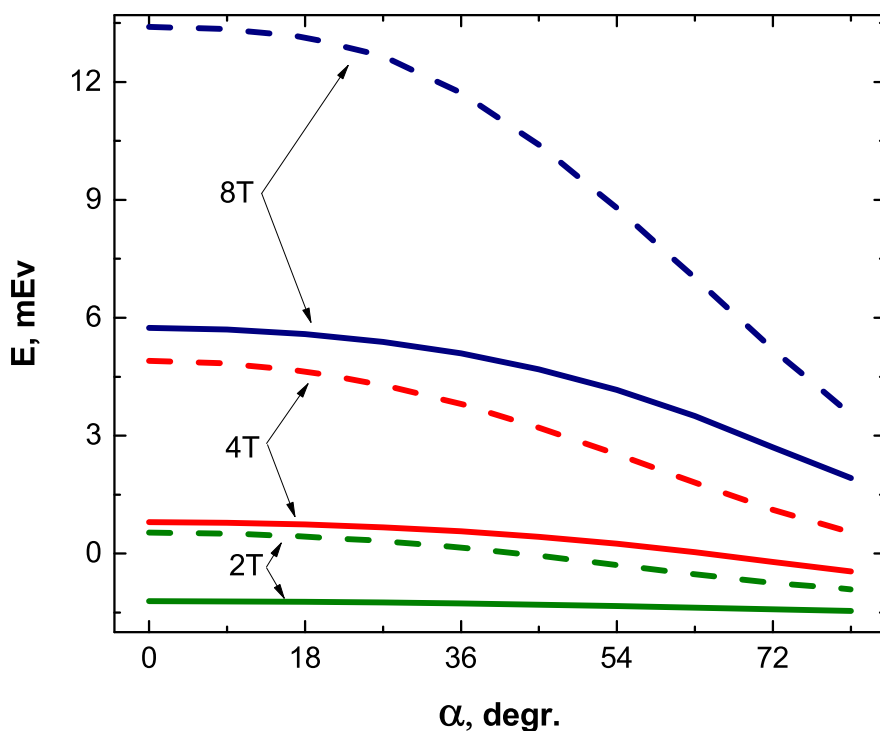


Рис. 3.9. То же, что на рис. 3.7, но для 2D экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As при различной величине магнитного поля: $B = 2, 4, 8$ Т. $B = 2$ Т обозначено зеленой линией, $B = 4$ Т —красной линией, $B = 8$ Т — синей линией.

Таблица 3.7. Значения энергии E_1 **первого** возбужденного состояния 2D атома водорода при различных величинах магнитного поля и углах наклона α .

B , а.у.	0°	27°	54°	81°
0.5	-0.27678405	-0.26528554	-0.23126243	-0.17640957
1	-0.20392330	-0.18813374	-0.14614052	-0.08150442
2	0.04130874	0.06072439	0.09548195	0.14038591
4	0.67852876	0.69653696	0.67573616	0.62258164
10	2.95734799	2.94208198	2.62839018	2.14718594
100	43.74850351	44.23373675	35.01722779	26.51275203
1000	480.93444481	456.24798403	371.78493695	277.87663177
10000	4945.43794585	4650.63170583	3780.99288744	2816.81434104

Таблица 3.8. То же, что и в таблице 3.7 для значений энергии E_2 **второго** возбужденного состояния.

B , а.е.	0°	27°	54°	81°
0.5	-0.10686554	-0.08765517	-0.07627428	-0.11025339
1	0.00707007	0.03794284	0.06357988	0.02558182
2	0.31437038	0.36132446	0.36535958	0.28228436
4	1.04219925	1.10783242	1.02157341	0.79709702
10	3.50447015	3.57886264	3.12007058	2.39508346
100	45.41374489	45.60201238	37.19013487	28.16742401
1000	486.47671280	464.85293413	393.52867231	299.03138826
10000	4966.59383286	4723.50218673	4022.90347429	3060.77202297

Таблица 3.9. То же, что и в таблице 3.7 для значений энергии E_3 **третьего** возбужденного состояния.

B , а.е.	0°	27°	54°	81°
0.5	0.04072983	-0.01085554	0.00438870	-0.05474697
1	0.49549097	0.1425023882	0.17184677	0.15375924
2	1.57853526	0.50673360	0.50625030	0.42459900
4	4.00329697	1.31189496	1.22852674	1.00456007
10	11.89181281	3.90040567	3.54926952	2.86808926
100	140.5148315	46.95758876	41.68141369	33.12068670
1000	1470.80545235	477.30100986	438.29023420	345.22282692
10000	14854.71822028	4847.91395473	4451.92041328	3496.02256291

3.3. Основные выводы

Целью работы является численное исследование анизотропных особенностей двумерного (2D) атома водорода в магнитном поле. Вычислены энергия основного состояния (ЭОС) двумерного атома водорода и соответствующая волновая функция в приближении Борна-Оппенгеймера и с учетом конечной массы протона.

Обнаружена нелинейная зависимость ЭОС от угла α между направлением вектора индукции магнитного поля и нормалью к плоскости движения электрона в широком диапазоне величины магнитного поля.

С увеличением угла α до 90° наблюдается эффект значительного (до 1.9 раза) уменьшения ЭОС 2D атома водорода.

Получено согласие с экспериментальными данными и определены зависимости ЭОС 2D экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As для различных углов наклона и величин магнитного поля, применяемых в реальных экспериментальных установках при исследовании свойств экситонов.

Проблема 2D атома водорода в магнитном поле расширена на случай произвольной направленности магнитного поля. Предложенный для ее решения алгоритм верифицирован на задачах 2D атома водорода в отсутствии внешних полей и 2D атома водорода в магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости движения электрона.

Для обобщения на случай произвольной направленности магнитного поля численно рассчитана зависимость энергии основного состояния (ЭОС) 2D атома водорода от величины магнитного поля и от угла α между направлением магнитного поля и нормалью к плоскости движения электрона.

Вычислена зависимость ЭОС 2D экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As от угла наклона α для магнитных полей от 2 до 10 Т. В ходе численных расчетов показано, что при увеличении α от 0° до 90° ЭОС как в случае 2D атома водорода, так и 2D экситона уменьшается нелинейным образом.

Обнаруженная зависимость ЭОС 2D экситонов от угла наклона магнитного поля свидетельствует о явной возможности влиять на энергию связи и спектральные характеристики экситонов направлением магнитного поля.

Результаты, представленные в главе 3, опубликованы в работах [A2, A3, A7].

Статистические свойства спектров двумерного атома водорода и экситона в наклонном магнитном поле и квантовый хаос

Статистические свойства энергетического спектра и квантовый хаос в атоме водорода в магнитном поле исследовались ранее в основном для трехмерного (3D) случая [80–83, 85, 86]. Возникновением квантового хаоса в системе принято считать изменение статистических распределений межуровневых интервалов энергетического спектра [84], сопровождаемое изменением динамики классического аналога изучаемой системы. Инициирование хаоса установлено как в случае квантовой [85, 86], так и классической модели 3D атома водорода [80–83].

В данной главе нами изучаются статистические свойства энергетических спектров 2D атома водорода и экситона в квантовой яме $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ в произвольно направленном магнитном поле для широкого диапазона величины напряженности магнитного поля и угла наклона α направления магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц. Наклонное магнитное поле индуцирует анизотропию эффективного потенциала взаимодействия, которая существенно влияет на статистические свойства энергетического спектра. Например, анизотропные взаимодействия в квантовых точках [107] приводят к кардинальной перестройке спектра. Нами также исследована соответствующая классическая динамика с изменением угла наклона α .

4.1. О влиянии направления магнитного поля на статистические свойства спектра (отталкивание уровней и разрушение оболочечной структуры) и квантовый хаос

В данном разделе нами исследуются статистические свойства энергетического спектра 2D атома водорода для произвольно направленного магнитного поля.

4.1.1. Квантовая динамика: Магнитное поле, направленное перпендикулярно атомной плоскости

В случае **направления магнитного поля вдоль нормали к атомной плоскости** ($\alpha = 0^\circ$) гамильтониан (3.3) обладает аксиальной симметрией. Это приводит к кластеризации уровней, обнаруженной нами в рассчитанном спектре и иллюстрируемой на рис. 4.1(а) для различных величин магнитного поля (от 0.5 до 5 а.е.). Под кластеризацией понимается, что энергетические уровни объединяются в кластеры по главному квантовому числу, в то время как магнитное квантовое число обозначает положение уровня энергии внутри группы. Для $B \geq 0.5$ а.е. ($\alpha = 0^\circ$) также наблюдается оболочечная структура атомных уровней (см. рис. 4.1(а)), которая формируется благодаря эквидистантному спектру квадратичного по величине магнитного поля "осцилляторного" слагаемого (3.6) эффективного потенциала V_{eff} .

Для изучения поведения системы получены функции распределения $P(\Delta E)$ междууровневых интервалов $dE = E_{j+1} - E_j$ (РМИ) для спектров 2D атома водорода для величины магнитного поля $B = 0.5$ а.е.. Иллюстрируемое на рис. 4.2 (а) РМИ для $\alpha = 0^\circ$ демонстрирует хорошее согласие с Пуассоновским распределением

$$P(dE) = \exp(-dE), \quad (4.1)$$

указывающим на преобладание регулярного движения [84] и кластеризацию уровней (функция распределения максимальна при малых значениях междуровневых интервалов). Небольшое возрастание РМИ в области $dE \approx \omega_L$, сравнимых с ларморовской частотой $\omega_L \equiv \frac{1}{2}B$, возникает из-за преимущественного влияния спектра “осцилляторного” вклада квадратичного по полю слагаемого эффективного потенциала взаимодействия (3.5) и достаточно сильных рассматриваемых магнитных полей.

Размеры кластеров энергетических уровней, определенные из вычисленных спектров для $B > 10^3$ а.е., находятся в согласии с аналитической оценкой размеров кластеров Ландау в пределе сильных магнитных полей работы [76].

4.1.2. Квантовая динамика: произвольно направленные магнитные поля

С целью изучения влияния направления магнитного поля на спектр 2D атома водорода нами численно рассчитаны нелинейные зависимости энергии возбужденных уровней рассматриваемой системы от величины **наклонного магнитного поля для различных углов наклона** α в отличие от работ других авторов [4, 74, 76] и др., в которых свойства системы изучались в магнитном поле, направленном строго перпендикулярно плоскости движения электрона.

На рис. 4.1 (б,в) представлены рассчитанные спектры 2D атома водорода направленного под углом $\alpha = 9^\circ$ к нормали к атомной плоскости для различных величин магнитного поля (б), при различных углах наклона α для $B = 0.5$ а.е. (в). Рисунок 4.1 (б,в) наглядно свидетельствует, что увеличение угла наклона направления магнитного поля приводит к полному изменению спектра 2D атома водорода: резко возрастает число энергетических уровней с одновременным уменьшением междуровневых интервалов и постепенным сокращением промежутков между энергетическими кластерами.

При малых углах ($\alpha \leq 10^\circ$), возбужденные энергетические уровни расщепляются, сохраняя оболочечную структуру, что проиллюстрировано на

рис. 4.1 (б), и РМИ пуассоновского вида (см. рис. 4.2 (б)).

При дальнейшем увеличении угла наклона α (например, $\alpha \geq 27^\circ$ на рис. 4.2 (в,г,д)) обнаружено возникновение квантового хаоса, инициированного изменением направления магнитного поля и активизации анизотропной части потенциала (3.6). Квантовый хаос проявляется в отталкивании соседних уровней [108]. Подобное поведение спектра подтверждается характерным убыванием РМИ для малых значений междууровневых интервалов dE (см. рис. 4.2(в,г,д)). Изменения в энергетическом спектре также сопровождаются соответствующим изменением РМИ, приведенном на рис. 4.2(в,г,д), где также продемонстрировано хорошее согласие РМИ с характерным для режима квантового хаоса Вигнеровским распределением [83, 84]:

$$P(dE) = \frac{1}{2}\pi dE \exp(-\pi dE^2/4). \quad (4.2)$$

Исходя из анализа рис. 4.1(в) заметим, что с увеличением анизотропии (при увеличении угла α до 90°) оболочечная структура, типичная для спектра в изотропном случае, исчезает, что связано с расщеплением вырожденных возбужденных состояний системы в случае, когда магнитное поле направлено вдоль нормали к плоскости движения электрона. Вырождение из-за аксиальной симметрии возникает как в состояниях Ландау (в отсутствии кулоновского взаимодействия) [76], так и в 2D атоме водорода (в отсутствии магнитного поля).

Пространственные распределения квадрата модуля волновой функции первых трех возбужденных состояний претерпевают значительную трансформацию с увеличением наклона магнитного поля. Из-за анизотропии взаимодействия проекция L_z углового момента на ось Z не сохраняется и возникает выделенное направление вдоль проекции поля на атомную плоскость (в выбранной системе координат совпадающее с осью X). Вышеупомянутые распределения вытягиваются вдоль вдоль оси X с одновременным сжатием вдоль оси Y , особенно проявляющееся при $\alpha \rightarrow 90^\circ$.

Следует отметить, что для критического случая $\alpha = 90^\circ$, когда магнитное поле лежит в атомной плоскости $B_z = 0$, осцилляторное слагаемое вдоль оси X (3.6) исчезает и потенциал не приводит к образованию связанных состояний в положительной области спектра. Таким образом для $\alpha = 90^\circ$ энергетические уровни возбужденных состояний, выталкиваемые с ростом магнитного поля в область положительных значений спектра перестают существовать с некоторого критического (для них) значения величины магнитного поля.

Для рассмотрения реальной физической системы, такой как 2D экситон в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As, необходимо изменить массы частиц на эффективные массы электрона $m_e^* = 0.067m_e$ и тяжелой дырки $m_h = 0.18m_e$ [104]. Необходимо также добавить фактор $1/\epsilon$ ($\epsilon = 12.1$ – диэлектрическая постоянная) в член, отвечающий за кулоновское взаимодействие. Таким образом, гамильтониан (3.3) для 2D экситона имеет вид:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2 + 2(\mu_h - \mu_e)(\mathbf{A}_\rho \cdot \mathbf{p}) + \mathbf{A}_\rho^2}{2m_r} - \frac{1}{\epsilon\rho}, \quad (4.3)$$

где $\mu_h = \frac{m_h}{m_h + m_e^*}$, $\mu_e = \frac{m_e^*}{m_h + m_e^*}$; $m_r = \frac{m_h m_e^*}{m_h + m_e^*}$. Применяя предложенный нами численный алгоритм для вычисления спектра 2D экситона, мы получили характеристики связанных состояний экситона при типичных для лабораторных экспериментов величинах магнитного поля в пределах от $B = 2\text{T}$ до $B = 8\text{T}$.

Нами проанализированы РМИ для экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As, которые были получены с помощью вычисленных спектров энергии для различных углов наклона и величин напряженности магнитного поля, и их поведение схоже с РМИ для 2D атома водорода. Обнаружен эффект инициирования квантового хаоса с увеличением угла наклона α для экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As.

Количественные различия энергетических спектров 2D атома водорода и экситона возникают из-за диэлектрической постоянной в выражении, отвечающем за кулоновское взаимодействие, а также из-за различия в массах частиц в 2D атоме водорода и экситона в гамильтониане (3.3) (см., например, работу [104]).

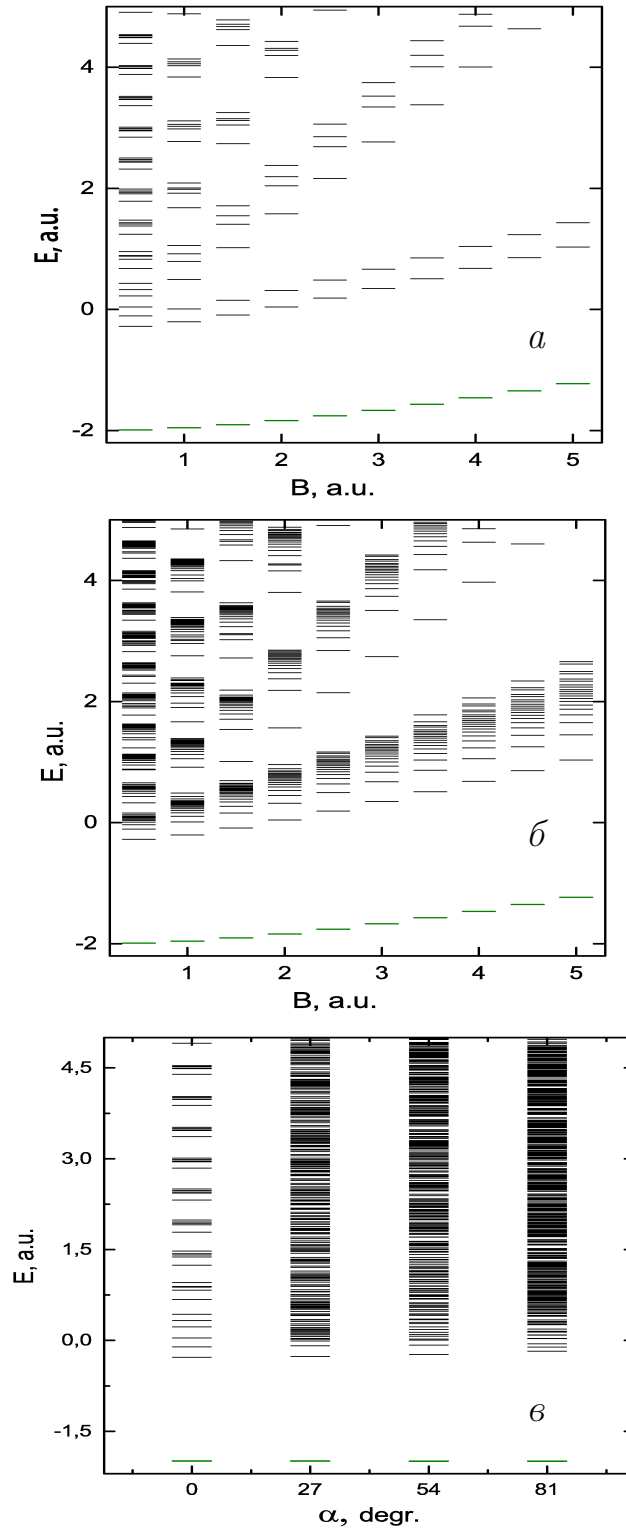


Рис. 4.1. Спектр двумерного атома водорода при различной величине магнитного поля, направленного перпендикулярно атомной плоскости (а), под углом $\alpha = 9^\circ$ к нормали к атомной плоскости (б), при различных углах наклона α для $B = 0.5$ а.е. (в). Основное состояние на рисунке отмечено зеленой линией.

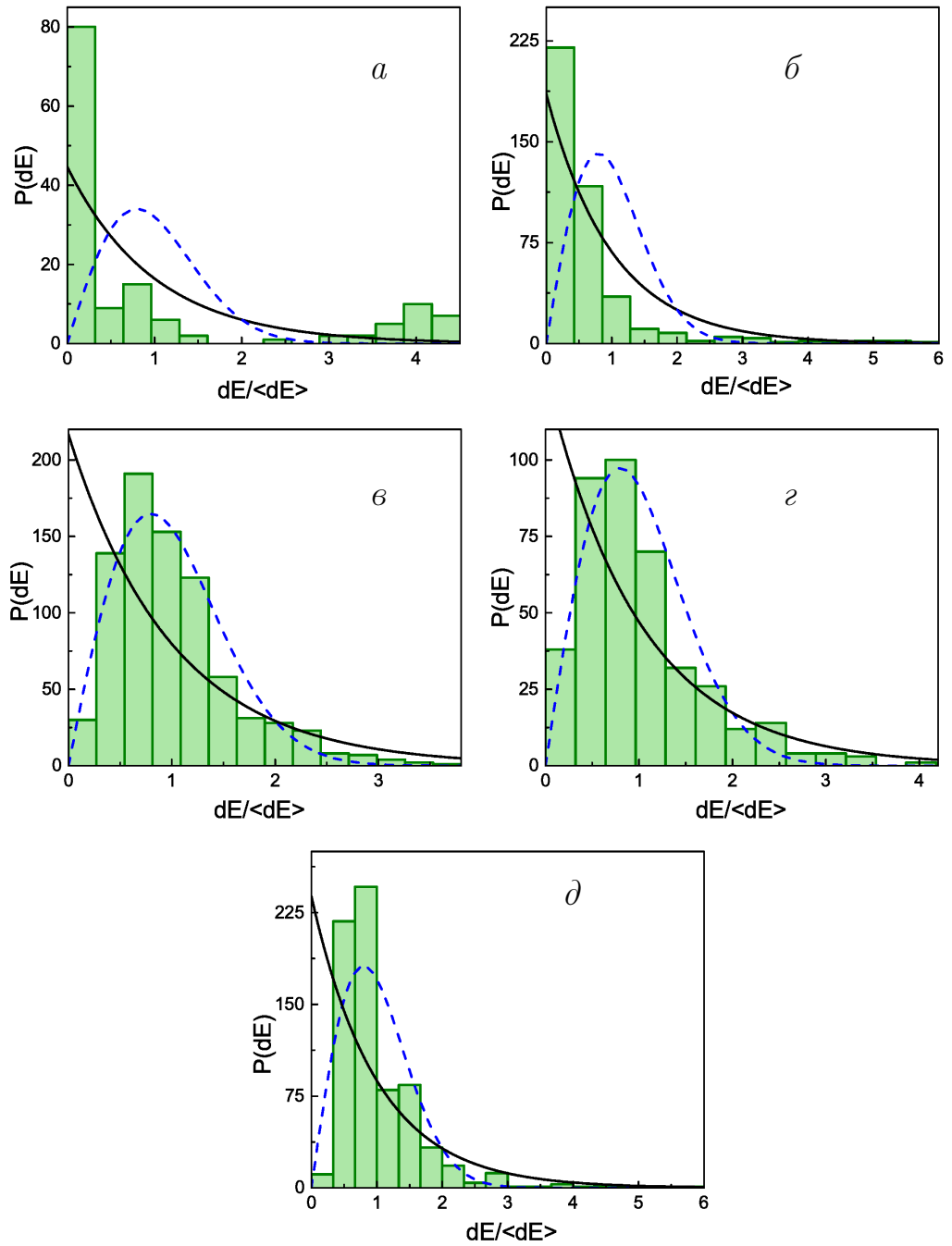


Рис. 4.2. Гистограммы ненормализованного распределения $P(dE)$ нормализованных междууровневых интервалов $dE/\langle dE \rangle$ при $B = 0.5$ а.е. при различных углах наклона α : $\alpha = 0^\circ$ (а), $\alpha = 9^\circ$ (б), $\alpha = 27^\circ$ (в), $\alpha = 54^\circ$ (г), $\alpha = 81^\circ$ (д). Сплошной кривой обозначено распределение Пуассона, штриховой линией — распределение Вигнера.

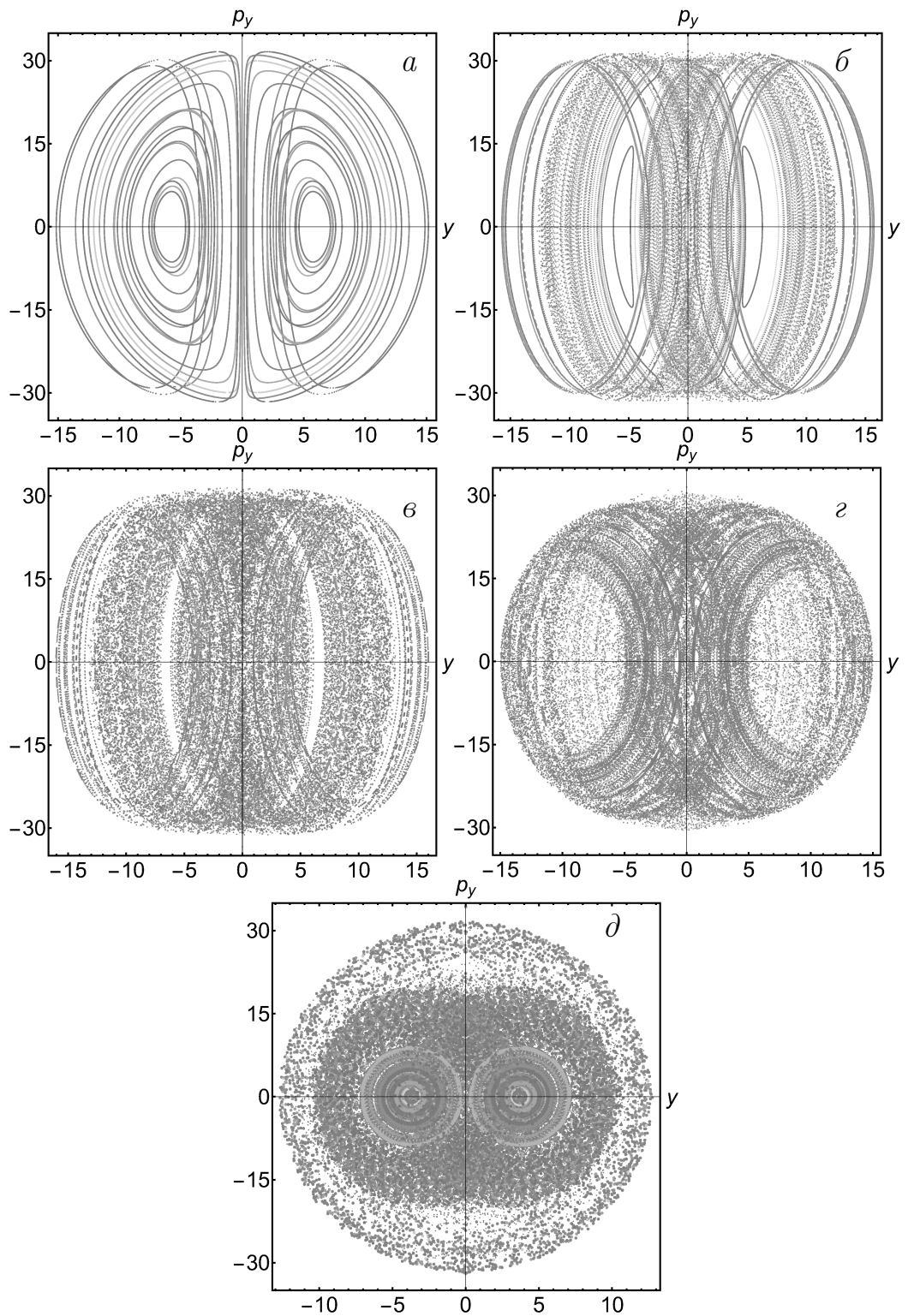


Рис. 4.3. Сечения Пуанкаре (y, p_y для $x = 0$) для различных углов наклона направления магнитного поля α : $\alpha = 0^\circ$ (а), $\alpha = 9^\circ$ (б), $\alpha = 27^\circ$ (в), $\alpha = 54^\circ$ (г), $\alpha = 81^\circ$ (д) при $E = 500$ а.е. и $B = 5.0$ а.е..

4.2. Классическая динамика 2D атома водорода в наклонном магнитном поле

В данном разделе мы исследуем динамику классической модели исследуемой системы 2D атома водорода в наклонном постоянном магнитном поле. Для решения этой задачи вместо уравнения Шредингера численно интегрируются уравнения Гамильтона:

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H_{cl}}{\partial x}; \quad \dot{p}_y = -\frac{\partial H_{cl}}{\partial y}; \quad \dot{x} = \frac{\partial H_{cl}}{\partial p_x}; \quad \dot{y} = \frac{\partial H_{cl}}{\partial p_y}. \quad (4.4)$$

с классическим аналогом гамильтониана (3.3):

$$H_{cl} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_r} + \frac{1}{2m_r} [(\mu_1 - \mu_2) B \cos(\alpha)(xp_y - yp_x) + \frac{1}{4}B^2 (x^2(1 - \sin^2(\alpha)) + y^2)] - \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}. \quad (4.5)$$

Отметим, что z -проекция L_z углового момента сохраняется только в случае $\alpha = 0^\circ$. Для наклонных магнитных полей L_z более не сохраняется, что приводит к постепенному разрушению регулярного движения. Для анализа классической динамики системы нами построены используемые для этого сечения Пуанкаре для различных значений угла наклона магнитного поля α : $\alpha = 0^\circ$ (а), 9° (б), 27° (в), 54° (г), 81° (д). Сечения Пуанкаре представлены на рис. 4.3 (а–д). Как видно из рис. 4.3 (а) в случае магнитного поля, направленного вдоль нормали к атомной плоскости ($\alpha = 0^\circ$), в фазовом пространстве имеются только замкнутые траектории, т.е. движение системы является регулярным. Анализ рис. 4.3 (б)–(д) показывает, что при $\alpha = 9^\circ$ в системе сохраняется регулярный режим движения, но при $\alpha = 27^\circ, 54^\circ, 81^\circ$ преобладает хаотический режим. С увеличением угла α доля хаоса в фазовом пространстве увеличивается, достигая максимума при $\alpha \rightarrow 90^\circ$.

Заметим, что результаты, полученные на основе классической динамики, находятся в полном согласии с результатами для квантового случая, подтверждая утверждение о возникновении хаоса с увеличением угла наклона.

4.3. Основные выводы

В работе исследуются характеристики возбужденных состояний 2D атома водорода и экситона в $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ в широком диапазоне напряженности магнитного поля. Нами также изучена классическая динамика системы. В случае направленного перпендикулярно атомной плоскости магнитного поля наблюдается кластеризация и оболочечная структура уровней. Оболочечная структура при $\alpha = 0^\circ$ формируется благодаря эквидистантному спектру квадратичного по магнитному полю "осцилляторного" выражения эффективно-го потенциала взаимодействия. Рассчитанные при $\alpha = 0^\circ$ РМИ воспроизводят пуассоновский вид распределения, ассоциируемый с регулярной динамикой системы. Для малых углов наклона α в системе еще сохраняется регулярная динамика с расщеплением возбужденных уровней из-за анизотропии взаимодействия. С увеличением угла наклона α в системе изменяются её статистические свойства и возникает квантовый хаос, подтверждаемый сменой вида РМИ с распределения Пуассона на распределение Вигнера и соответствующим переходом от регулярного к хаотическому режиму движения в соответствующей классической системе.

Определены различия рассчитанных нами зависимостей энергий для различных возбужденных состояний от угла наклона α в широком диапазоне величины магнитного поля.

Продемонстрирована эволюция пространственных распределений квадрата волновой функции с увеличением угла наклона α . Определены различия рассчитанных нами зависимостей энергий для различных возбужденных состояний от угла наклона α в широком диапазоне величины магнитного поля.

Увеличение угла наклона магнитного поля приводит к полному изменению спектров 2D атома водорода и экситона в $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$: резко возрастает число энергетических уровней, уменьшаются интервалы между кластерами энергетических уровней. Таким образом, необходимо отметить важный резуль-

тат: посредством изменения направления внешнего магнитного поля возможно контролировать свойства спектров абсорбции экситона и примеси в полупроводниках.

Результаты, представленные в главе 4, опубликованы в работах [[A3](#), [A6](#)].

Заключение

Приведем основные результаты диссертации.

- При анализе квантового рассеяния в двумерном пространстве *произвольно ориентированных диполей* в случае взаимной ортогональности их плоскостей поляризации выявлен ярко выраженный *резонансный характер рассеяния при изменении угла наклона одного из диполей*, если другой диполь ориентирован в плоскости рассеяния.
- Показано, что *при двумерном квантовом рассеянии двух неполяризованных диполей увеличение угла между плоскостями поляризации диполей* приводит к сужению области резонансных осцилляций сечения рассеяния с одновременным уменьшением их амплитуды до полного исчезновения осцилляций.
- Впервые обнаружена нелинейная зависимость энергий основного и возбужденных состояний “двумерного” атома водорода и “двумерного” экситона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As от угла наклона α вектора напряженности магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц в широком диапазоне величин напряженности произвольно направленного магнитного поля: с увеличением угла наблюдается эффект значительного уменьшения энергии основного и возбужденных состояний.
- Выявлена существенная зависимость статистических свойств энергетического спектра “двумерного” атома водорода от ориентации вектора напряженности магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц. С ростом угла наклона α вырожденные до этого уровни расщепляются и уменьшаются интервалы между кластерами энергетических уровней. При увеличении угла наклона α обнаружен переход распределений

межуровневых интервалов энергетического спектра “двумерного” атома водорода от распределения Пуассона к распределению Вигнера, свидетельствующий о возникновении в системе квантового хаоса, что подтверждается результатами проведенного анализа классической динамики системы.

В заключении, хочу выразить глубокую благодарность моему научному руководителю В. С. Мележику за постановку задач, решенных в диссертации, полезные советы при обсуждении результатов и неоценимую помощь в работе.

Я благодарен В. В. Пупышеву, С. И. Виницкому за конструктивные обсуждения материалов работ.

Приложение А

Конечно-разностная аппроксимация краевой задачи

Для представления в матричной форме систем дифференциальных уравнений, к которым, как показано в главах 1 и 2, сводится уравнение Шредингера и граничные условия на волновую функцию, введем обозначения матрицы оператора $h^{(0)}$ и вектора, состоящего из радиальных функций $\psi_j(\rho)$ ($j = 0, 1, \dots, 2M$):

$$h_{jj'}^{(0)} = -\frac{1}{(2M+1)} \sum_{m=-M}^M m^2 e^{im(\phi_j - \phi_{j'})}$$

,

$$\boldsymbol{\psi}(\rho) = \{\psi_0(\rho), \psi_1(\rho), \dots, \psi_{2M}(\rho)\}.$$

Для задачи рассеяния краевая задача имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \boldsymbol{\psi}(\rho) + \left[\frac{1}{4} \hat{I} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \rho^2 (E \hat{I} - \hat{U}(\rho)) \right] \boldsymbol{\psi}(\rho) + \hat{h}^{(0)} \boldsymbol{\psi}(\rho) = 0 \\ \boldsymbol{\psi} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \text{const} \times \sqrt{\rho} \\ \frac{\sqrt{2\pi}}{(2M+1)\sqrt{\rho}} \sum_{j=0}^{2M} e^{-im\phi_j} \psi_j(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} i^m J_m(q\rho) \sqrt{2\pi} + \frac{f_m(\phi_q)}{\sqrt{-i\rho}} e^{iq\rho}, \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

где матрица потенциала диагональна и состоит из значений потенциала в узлах сетки по угловой переменной

$$\hat{U}(\rho) = \text{diag} [U(\rho, \phi_q, \phi_0), U(\rho, \phi_q, \phi_1), \dots, U(\rho, \phi_q, \phi_{2M})].$$

Проблема на связанные состояния описывается задачей на собственные значения и собственные функции:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2}{d\rho^2} \boldsymbol{\psi}(\rho) + \left[\frac{1}{4\rho^2} \hat{I} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E \hat{I} - \hat{U}(\rho)) \right] \boldsymbol{\psi}(\rho) + \frac{1}{\rho^2} \hat{h}^{(0)} \boldsymbol{\psi}(\rho) = 0 \\ \boldsymbol{\psi} \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \text{const} \times \sqrt{\rho} \\ \boldsymbol{\psi} \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0, \end{array} \right. \quad (\text{A.2})$$

где из-за наличия оператора дифференцирования $\hbar^{(1)} \equiv L_z$ в гамильтониане двумерного атома водорода и экситона, описанного в главе 3 будем считать матрицу оператора общей недиагональной матрицей $(\hat{U}(\rho))_{jj'} = U_{jj'}$.

В используемом нами представлении волновой функции (1.3) угловая зависимость учтена в матрице $\hat{h}^{(0)}$, а взаимодействие включено в матрицу потенциала $\hat{U}(\rho)$. Постоянная матрица $\hat{h}^{(0)}$ связывает все уравнения в системе и не зависит от радиальной переменной. Таким образом, нет необходимости вычислять матричные элементы потенциала, что существенно минимизирует вычислительные затраты и время расчетов.

Для решения задач (A.1) и (A.2) семиточечная конечно-разностная аппроксимация второй производной шестого порядка точности

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\rho^2}\psi_n = \frac{1}{180\hbar^2} (2\psi_{n-3} - 27\psi_{n-2} + 270\psi_{n-1} - \\ - 490\psi_n + 270\psi_{n+1} - 27\psi_{n+2} + 2\psi_{n+3}) + O(\hbar^6) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

применена в точках ρ_n сетки по радиальной переменной, где $\psi_n \equiv \psi(\rho_n)$, ($n = 3, 4, \dots, N - 3$).

В результате, системы (A.1) и (A.2) преобразуются к системам линейных алгебраических уравнений с матрицей \hat{A} , блочно-диагональная структура которой имеет вид:

$$\sum_{n'} \hat{A}_{nn'} \psi_{n'} = \mathbf{F}_n, \quad (\text{A.4})$$

где коэффициенты $\hat{A}_{nn'}$ — квадратные матрицы размером $(2M + 1) \times (2M + 1)$, а элементы \mathbf{F}_n правой части уравнения (A.4) — $(2M + 1)$ -мерные вектора. Функции ψ_{-3} , ψ_{-2} и ψ_{-1} и ψ_0 исключаются при аппроксимации A.3 с помощью левого граничного условия, примененного в следующей форме: $\psi_{-k} = -\psi_k$ ($k = 1, 2, 3$); $\psi_0 = 0$.

Для сведения задачи рассеяния к краевой задаче применяется подход, предложенный в работе [32]: уравнение (2.9), записанное для последних трех точек сетки по радиальной переменной ρ_{N-2} , ρ_{N-1} и ρ_N , рассматривается как

система векторных уравнений относительно вектора $f_m(\phi_q)$. Исключив вектор $f_m(\phi_q)$ из упомянутой системы, правое граничное условие записывается в виде:

$$\sum_{j'} \{A_{jj',NN-1}\psi_{j'}(\rho_{N-1}) + A_{jj',NN}\psi_{j'}(\rho_N)\} = F_{j,N}(q, \rho_{N-1}, \rho_N). \quad (\text{A.5})$$

Применив правое граничное условие в последних трех точках $n = N - 2, N - 1, N$ сетки по радиальной переменной и, аналогично, левое граничное условие — в первых трех точках $n = 1, 2, 3$, представим детальную структуру матрицы \hat{A} в виде:

$$\begin{cases} \sum_{n'=n}^{n+1} \hat{A}_{nn'}\psi_{n'} = \mathbf{F}_n, & n = 1, 2, 3 \\ \sum_{n'=n-3}^{n+3} \hat{A}_{nn'}\psi_{n'} = \mathbf{F}_n, & n = 3, 4, \dots, N - 3 \\ \sum_{n'=n-1}^n \hat{A}_{nn'}\psi_{n'} = \mathbf{F}_n, & n = N - 2, N - 1, N, \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Блочная структура системы (A.6) предоставляет некоторые важные преимущества. Блочная матрица сохраняется в упакованной форме, что позволяет оптимально использовать ресурсы. Система (A.6) решается с помощью быстрого неявного матричного алгоритма, основанного на идее блочной матричной прогонки [96], описание которого приведено в Приложении Б.

Сходимость вычислительной схемы

В таблице 2.2 мы иллюстрируем сходимость вычисленной амплитуды рассеяния $f(q, \phi, \phi_q)$ по числу узлов $2M + 1$ сетки по угловой переменной для рассеивателей со слабой и сильной анизотропией при $a(\pi/2)/a(0) = 1.1$ и 2 в потенциальном барьере (2.12). В этом случае $a(\pi/2)/a(0) = 1.1$ мы достигли точности в четыре значащих цифры для амплитуды рассеяния на сетке по угловой переменной при $M = 5$. Для более сильной анизотропии $a(\pi/2)/a(0) = 2$ точность в две значащих цифры достигнута при $M = 30$. Число точек сетки по радиальной переменной N и граница интегрирования ρ_N выбирались таким образом, чтобы обеспечить точность в четыре значащих цифры в рассчитываемых амплитудах.

Приложение Б

Матричная модификация алгоритма прогонки для семидиагональных блочных матриц

В данном приложении мы приводим описание матричной модификации алгоритма прогонки для решения матричного уравнения (A.6).

Следуя идее метода прогонки [96], решение уравнения (A.6) определяется в следующей форме:

$$\boldsymbol{\psi}_j = W_j^{(1)}\boldsymbol{\psi}_{j+1} + W_j^{(2)}\boldsymbol{\psi}_{j+2} + W_j^{(3)}\boldsymbol{\psi}_{j+3}, \quad j = 1, \dots, N - 3 \quad (\text{Б.1})$$

где W_j представляют собой матрицы $[2M + 1] \times [2M + 1]$. Для определения искомых векторов $\boldsymbol{\psi}_j$ ($j = 1, \dots, N - 3$) необходимо вычислить матричные коэффициенты W_j . Для этого, записав уравнение (Б.1) в соседних трех точках:

$$\boldsymbol{\psi}_{j-k} = W_j^{(1)}\boldsymbol{\psi}_{j-k+1} + W_j^{(2)}\boldsymbol{\psi}_{j-k+2} + W_j^{(3)}\boldsymbol{\psi}_{j-k+3}, \quad k = 1, 2, 3 \quad (\text{Б.2})$$

выразим $\boldsymbol{\psi}_{j-1}$ через $\boldsymbol{\psi}_j, \boldsymbol{\psi}_{j+1}, \boldsymbol{\psi}_{j+2}$:

$$\boldsymbol{\psi}_{j-1} = W_{j-1}^{(1)}\boldsymbol{\psi}_j + W_{j-1}^{(2)}\boldsymbol{\psi}_{j+1} + W_{j-1}^{(3)}\boldsymbol{\psi}_{j+2}. \quad (\text{Б.3})$$

Аналогично для $\boldsymbol{\psi}_{j-2}$ запишем:

$$\boldsymbol{\psi}_{j-2} = \left[W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(2)} \right] \boldsymbol{\psi}_j + \left[W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(2)} + W_{j-2}^{(3)} \right] \boldsymbol{\psi}_{j+1} + W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(3)}\boldsymbol{\psi}_{j+2}. \quad (\text{Б.4})$$

Для $\boldsymbol{\psi}_{j-3}$ искомое выражение имеет вид:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\psi}_{j-3} = & \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(2)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(3)} \right] \boldsymbol{\psi}_j \\ & + \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(2)} + W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(2)} \right] \boldsymbol{\psi}_{j+1} \\ & + \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(3)} \right] \boldsymbol{\psi}_{j+2}, \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

Из подстановки ψ_j из выражений (Б.3–Б.5) в матричное уравнение (А.6) и сравнения полученных выражений с уравнением Б.1 следует, что рекуррентные соотношения для вычисления коэффициентов $W_j^{(1)}$ записываются в виде:

$$\begin{aligned} -QW_j^{(1)} = & \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(2)} + W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(2)} \right] + \\ & \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(2)} + W_{j-2}^{(3)} \right] + \hat{A}_{j,j-1}W_{j-1}^{(2)} + \hat{A}_{j,j+1}, \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

для коэффициентов $W_j^{(2)}$ представимы в следующей форме:

$$\begin{aligned} -QW_j^{(2)} = & \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(3)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(3)} \right] + \\ & \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(3)} \right] + \hat{A}_{j,j-1}W_{j-1}^{(3)} + \hat{A}_{j,j+2}, \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

для коэффициентов $W_j^{(3)}$ задаются следующим выражением:

$$-QW_j^{(3)} = \hat{A}_{j,j+3}. \quad (\text{Б.8})$$

Матрица Q определяется соотношением:

$$\begin{aligned} Q = & \hat{A}_{j,j-3} \left[W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-3}^{(1)}W_{j-2}^{(2)} + W_{j-2}^{(2)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(3)} \right] + \\ & \hat{A}_{j,j-2} \left[W_{j-2}^{(1)}W_{j-1}^{(1)} + W_{j-2}^{(2)} \right] + \hat{A}_{j,j-1}W_{j-1}^{(1)} + \hat{A}_{j,j}. \end{aligned} \quad (\text{Б.9})$$

Коэффициенты $W_1^{(1)}, W_1^{(2)}, W_1^{(3)}$ вычисляются с помощью первых трех уравнений системы (А.6). Остальные коэффициенты $W_j^{(1)}, W_j^{(2)}, W_j^{(3)}$ ($j = 2, N$) вычисляются из рекуррентных соотношений (Б.6–Б.8), что аналогично «прямому ходу прогонки». Затем из последних трех уравнений системы (А.6) вычисляются ψ_j ($j = N - 2, N - 1, N$) и с помощью рекуррентных соотношений (Б.1) («обратный ход прогонки») находим полное решение исходной задачи (А.6): ψ_j ($j = 1, N - 3$). Заметим, что результирующая сложность алгоритма является линейной по числу точек по радиальной переменной N , что значительно ускоряет вычисления по сравнению с методом Гаусса, LU-разложением, обладающими кубической сложностью по N : $O(N^3)$.

Список публикаций по теме диссертации

- A1. *Koval E. A., Koval O. A., Melezhik V. S.* Anisotropic quantum scattering in two dimensions // *Physical Review A*. — 2014. — Т. 89, № 5. — С. 052710.
- A2. *Koval E. A., Koval O. A.* Anisotropic Features of Two-Dimensional Hydrogen Atom in Magnetic Field // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2017. — Т. 125, № 1. — С. 35–42. — [ЖЭТФ **152**, 45 (2017)].
- A3. *Koval E. A., Koval O. A.* Excited states of two-dimensional hydrogen atom in tilted magnetic field: Quantum chaos // *Physica E*. — 2017. — Т. 93. — С. 160–166.
- A4. *Koval E., Koval O., Melezhik V.* Numerical solution of the quantum scattering problem in the plane // *Physics of Particles and Nuclei Letters*. — 2015. — Т. 12, № 3. — С. 448–451. — ISSN 15474771. — [Pis'ma v Zh. Fiz. Elem. Chastits At. Yadra **12**, 702 (2015)].
- A5. *Коваль О. А., Коваль Е. А.* Моделирование связанных состояний квантовых систем в двумерной геометрии атомных ловушек // *Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика*. — 2014. — Т. 2, № 1. — С. 369–374.
- A6. *Koval E., Koval O.* Two-dimensional exciton spectrum in GaAs quantum well in tilted magnetic field // *Book of Abstracts of the EGAS 49th conference of the European Group of Atomic Systems*. — 2017. — В31.
- A7. *Koval E., Koval O.* Theoretical Investigation of 2D Hydrogen in Magnetic Field // *Extended Abstracts of 12th European Conference on Atoms Molecules and Photons*. — 2016. — С. 273.
- A8. *Koval E., Koval O., Melezhik V.* Anisotropic quantum scattering in two dimensions // *Book of Abstracts of the EGAS 46th conference of the European Group of Atomic Systems*. — 2014. — С. 127.

- A9. *Koval E., Koval O.* Modeling of bound states of quantum systems in a two-dimensional geometry of atomic traps // Book of Abstracts of the EGAS 46th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2014. — C. 130.

Список цитируемой литературы

1. *Baranov M. A.* Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases // *Phys. Rep.* — 2008. — Т. 464. — С. 71.
2. *Ticknor C., Wilson R. M., Bohn J. L.* Anisotropic superfluidity in a dipolar Bose gas // *Physical review letters.* — 2011. — Т. 106, № 6. — С. 065301.
3. *Wang Y., Julienne P., Greene C. H.* Few-body physics of ultracold atoms and molecules with long-range interactions // *Annual Review of Cold Atoms and Molecules.* — World Scientific, 2015. — Гл. Chapter 2. С. 77—134.
4. *Escobar-Ruiz M. A., Turbiner A. V.* Two charges on plane in a magnetic field I. “Quasi-equal” charges and neutral quantum system at rest cases // *Annals of Physics.* — 2014. — Т. 340, № 1. — С. 37—59.
5. *Escobar-Ruiz M. A., Turbiner A. V.* Two charges on a plane in a magnetic field: II. Moving neutral quantum system across a magnetic field // *Annals of Physics.* — 2015. — Т. 359. — С. 405—418.
6. *Pupyshev V. V.* Scattering of a slow quantum particle on an axially symmetric short-range potential // *Physics of Atomic Nuclei.* — 2014. — Т. 77, № 5. — С. 664—675.
7. *Kim J., Melezhik V., Schmelcher P.* Suppression of Quantum Scattering in Strongly Confined Systems // *Physical Review Letters.* — 2006. — Ноябрь. — Т. 97, № 19. — С. 4—7. — ISSN 0031-9007.
8. *Saeidian S., Melezhik V. S., Schmelcher P.* Multi-Channel Atomic Scattering and Confinement-Induced Resonances in Waveguides. — 2008. — Февр.
9. *Melezhik V. S., Schmelcher P.* Quantum dynamics of resonant molecule formation in waveguides // *New Journal of Physics.* — 2009. — Июль. — Т. 11, № 7. — С. 073031. — ISSN 1367-2630.

10. *Avetisyan S., Chakraborty T., Pietiläinen P.* Magnetization of interacting electrons in anisotropic quantum dots with Rashba spin-orbit interaction // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. — 2016. — Т. 81. — С. 334–338.
11. Two-electron quantum dot in tilted magnetic fields: Sensitivity to the confinement model / Т. Frostad [и др.] // *The European Physical Journal B*. — 2013. — Т. 86, № 10. — С. 430.
12. Confinement-induced resonances in low-dimensional quantum systems / E. Haller [и др.] // *Physical review letters*. — 2010. — Т. 104, № 15. — С. 153203.
13. *Martinyanov K., Makhalov V., Turlapov A.* Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms // *Physical review letters*. — 2010. — Т. 105, № 3. — С. 030404.
14. *Turlapov A. V.* Fermi gas of atoms // *JETP letters*. — 2012. — Т. 95, № 2. — С. 96–103.
15. A high phase-space-density gas of polar molecules / К. .-.К. Ni [и др.] // *science*. — 2008. — Т. 322, № 5899. — С. 231–235.
16. Quantum-state controlled chemical reactions of ultracold potassium-rubidium molecules / S. Ospelkaus [и др.] // *Science*. — 2010. — Т. 327, № 5967. — С. 853–857.
17. Observation of Quantum Droplets in a Strongly Dipolar Bose Gas / I. Ferrier-Barbut [и др.] // *Phys. Rev. Lett.* — 2016. — Т. 116, вып. 21. — С. 215301.
18. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V.* Bose-Einstein condensation of dipolar excitons in double and single quantum wells // *physica status solidi (c)*. — 2008. — Т. 5, № 7. — С. 2379–2386.
19. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V.* Collective state of the Bose gas of interacting dipolar excitons // *Journal of applied physics*. — 2007. — Т. 101, № 8. — С. 081708.

20. *Browaeys A., Barredo D., Lahaye T.* Experimental investigations of dipole–dipole interactions between a few Rydberg atoms // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2016. — Т. 49, № 15. — С. 152001.
21. *Kosterlitz J. M., Thouless D. J.* Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems // Journal of Physics C: Solid State Physics. — 1973. — Т. 6, № 7. — С. 1181.
22. Fractional quantum Hall effect at $\nu=2/3$ and $3/5$ in tilted magnetic fields / L. W. Engel [и др.] // Physical Review B. — 1992. — Т. 45, № 7. — С. 3418.
23. New fractional quantum Hall state in double-layer two-dimensional electron systems / J. P. Eisenstein [и др.] // Physical review letters. — 1992. — Т. 68, № 9. — С. 1383.
24. Magnetic-field-induced superconductivity in a two-dimensional organic conductor / S. Uji [и др.] // Nature. — 2001. — Т. 410, № 6831. — С. 908.
25. *Sofo J. O., Chaudhari A. S., Barber G. D.* Graphane: A two-dimensional hydrocarbon // Physical Review B. — 2007. — Т. 75, № 15. — С. 153401.
26. Control of graphene’s properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane / D. C. Elias [и др.] // Science. — 2009. — Т. 323, № 5914. — С. 610–613.
27. The physics of dipolar bosonic quantum gases / T. Lahaye [и др.] // Rep. Prog. Phys. — 2009. — Т. 72. — С. 126401.
28. *Quéméner G.* Ultracold collisions of molecules // arXiv preprint arXiv:1703.09174. — 2017.
29. Cold and ultracold molecules: science, technology and applications / L. D. Carr [и др.] // New Journal of Physics. — 2009. — Т. 11, № 5. — С. 055049.

30. *Giannakeas P., Melezhik V., Schmelcher P.* Dipolar confinement-induced resonances of ultracold gases in waveguides // *Physical review letters*. — 2013. — Т. 111, № 18. — С. 183201.
31. *Timofeev V. B., Gorbunov A. V., Larionov A. V.* Long-range coherence of interacting Bose gas of dipolar excitons // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2007. — Т. 19, № 29. — С. 295209.
32. *Melezhik V. S., Hu C.-Y.* Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field // *Physical review letters*. — 2003. — Т. 90, № 8. — С. 083202.
33. *Ландау Л. Д., Lifshits E. M.* Курс теоретической физики: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — 6-е изд., испр. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2004.
34. *Simon B.* The bound state of weakly coupled Schrödinger operators in one and two dimensions // *Annals of Physics*. — 1976. — Т. 97, № 2. — С. 279—288.
35. *Lapidus I. R.* Quantum-mechanical scattering in two dimensions // *American Journal of Physics*. — 1982. — Т. 50, № 1. — С. 45—47.
36. *Pupyshev V.* Scattering of a slow quantum particle on an axially symmetric short-range potential // *Physics of Atomic Nuclei*. — 2014. — Т. 77, № 5. — С. 664—675.
37. *Pupyshev V. V.* Energies of weakly bound and near-threshold resonance states of a quantum particle in a two-dimensional plane // *Theoretical and Mathematical Physics*. — 2014. — Т. 179, № 1. — С. 472—489.
38. *Averbuch P. G.* Zero energy divergence of scattering cross sections in two dimensions // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1986. — Т. 19, № 12. — С. 2325.
39. *Бабиков В. В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Наука, 1976.

40. *Friedrich H.* Scattering theory. T. 872. — Springer, 2013.
41. *Rakityansky S., Elander N.* Analytic structure and power series expansion of the Jost function for the two-dimensional problem // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2012. — T. 45, № 13. — C. 135209.
42. *Pupyshev V. V.* The length and effective radius of two-dimensional scattering of a quantum particle by a centrally symmetric short-range potential // Theoretical and Mathematical Physics. — 2014. — T. 180, № 3. — C. 1051—1072.
43. *Pupyshev V. V.* Effective-radius approximation in the problem of two-dimensional scattering by a central short-range potential // Theoretical and Mathematical Physics. — 2015. — T. 182, № 2. — C. 264—283.
44. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering with a tilt // Physical Review A. — 2011. — T. 84, № 3. — C. 032702.
45. *Rosenkranz M., Bao W.* Scattering and bound states in two-dimensional anisotropic potentials // Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics. — 2011. — T. 84, № 5. — C. 1—5. — ISSN 10502947.
46. *Bloch I., Dalibard J., Zwirger W.* Many-body physics with ultracold gases // Reviews of modern physics. — 2008. — T. 80, № 3. — C. 885.
47. *Bruun G. M., Taylor E.* Quantum phases of a two-dimensional dipolar fermi gas // Physical review letters. — 2008. — T. 101, № 24. — C. 245301.
48. *Cremon J. C., Bruun G. M., Reimann S. M.* Tunable Wigner states with dipolar atoms and molecules // Physical review letters. — 2010. — T. 105, № 25. — C. 255301.
49. *Minnhagen P.* The two-dimensional Coulomb gas, vortex unbinding, and superfluid-superconducting films // Reviews of modern physics. — 1987. — T. 59, № 4. — C. 1001.

50. *Lee P. A., Nagaosa N., Wen X.-G.* Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity // Reviews of modern physics. — 2006. — Т. 78, № 1. — С. 17.
51. *Novoselov K. S.* Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland // Reviews of Modern Physics. — 2011. — Т. 83, № 3. — С. 837.
52. *Marinescu M., You L.* Controlling atom-atom interaction at ultralow temperatures by dc electric fields // Physical review letters. — 1998. — Т. 81, № 21. — С. 4596.
53. *Deb B., You L.* Low-energy atomic collision with dipole interactions // Physical Review A. — 2001. — Т. 64, № 2. — С. 022717.
54. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering // Physical Review A. — 2009. — Т. 80, № 5. — С. 052702.
55. *Ticknor C.* Quasi-two-dimensional dipolar scattering // Physical Review A. — 2010. — Т. 81, № 4. — С. 042708.
56. *Li Z., Alyabyshev S. V., Krems R. V.* Ultracold inelastic collisions in two dimensions // Physical review letters. — 2008. — Т. 100, № 7. — С. 073202.
57. *Olshanii M.* Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons // Physical Review Letters. — 1998. — АБГ. — Т. 81, № 5. — С. 938—941. — ISSN 0031-9007.
58. *Petrov D. S., Shlyapnikov G. V.* Interatomic collisions in a tightly confined Bose gas // Phys. Rev. A. — 2001. — Т. 64. — С. 012706.
59. Observation of scale invariance and universality in two-dimensional Bose gases / C.-L. Hung [и др.] // Nature. — 2011. — Т. 470, № 7333. — С. 236—239. — ISSN 1476-4687.
60. *Idziaszek Z., Calarco T.* Analytical solutions for the dynamics of two trapped interacting ultracold atoms // Physical Review A. — 2006. — Т. 74, № 2. — С. 022712.

61. Two cold atoms in a harmonic trap / T. Busch [и др.] // Foundations of Physics. — 1998. — Т. 28, № 4. — С. 549—559.
62. *Zaslav B., Zandler M. E.* Two-dimensional analog to the hydrogen atom // American Journal of Physics. — 1967. — Т. 35, № 12. — С. 1118—1119.
63. *Huang J. W.-K., Kozycki A.* Hydrogen atom in two dimensions // American Journal of Physics. — 1979. — Т. 47, № 11. — С. 1005—1005.
64. *Hassoun G. Q.* One-and two-dimensional hydrogen atoms // American Journal of Physics. — 1981. — Т. 49, № 2. — С. 143—146.
65. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory / X. L. Yang [и др.] // Physical Review A. — 1991. — Т. 43, № 3. — С. 1186.
66. *Kohn W., Luttinger J. M.* Theory of donor states in silicon // Physical Review. — 1955. — Т. 98, № 4. — С. 915.
67. Variational approach to quasi-two-dimensional hydrogenic impurities in arbitrary magnetic fields / R. Chen [и др.] // Physical Review B. — 1991. — Т. 44, № 15. — С. 8315.
68. *Villalba V. M., Pino R.* Energy levels of a two-dimensional hydrogenic donor in the presence of a constant magnetic field // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1996. — Т. 8, № 42. — С. 8067.
69. *Soylu A., Boztosun I.* Accurate iterative solution of the energy eigenvalues of a two-dimensional hydrogenic donor in a magnetic field of arbitrary strength // Physica B: Condensed Matter. — 2007. — Т. 396, № 1. — С. 150—154.
70. *Parfitt D. G. W., Portnoi M. E.* The two-dimensional hydrogen atom revisited // Journal of Mathematical Physics. — 2002. — Т. 43, № 10. — С. 4681—4691.

71. *Cisneros A., McIntosh H. V.* Symmetry of the Two-Dimensional Hydrogen Atom // Journal of Mathematical Physics. — 1969. — T. 10, № 2. — С. 277—286.
72. *Robnik M.* Hydrogen atom in a strong magnetic field: on the existence of the third integral of motion // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1981. — T. 14, № 12. — С. 3195.
73. *MacDonald A. H., Ritchie D. S.* Hydrogenic energy levels in two dimensions at arbitrary magnetic fields // Physical Review B. — 1986. — T. 33, № 12. — С. 8336.
74. *Soylu A., Bayrak O., Boztosun I.* The energy eigenvalues of the two dimensional hydrogen atom in a magnetic field // International Journal of Modern Physics E. — 2006. — T. 15, № 06. — С. 1263—1271.
75. *Taut M.* Two-dimensional hydrogen in a magnetic field: analytical solutions // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1995. — T. 28, № 7. — С. 2081.
76. *Robnik M., Romanovski V. G.* Two-dimensional hydrogen atom in a strong magnetic field // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 2003. — T. 36, № 29. — С. 7923.
77. *Dimova M. G., Kaschiev M. S., Vinitzky S. I.* The Kantorovich method for high-accuracy calculations of a hydrogen atom in a strong magnetic field: low-lying excited states // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2005. — T. 38, № 14. — С. 2337.
78. Calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions / О. Chuluunbaatar [и др.] // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2007. — T. 40, № 38. — С. 11485.

79. Atoms in strong magnetic fields: quantum mechanical treatment and applications in astrophysics and quantum chaos / H. Ruder [и др.]. — Springer Science & Business Media, 2012.
80. *Gutzwiller M. C.* Periodic orbits and classical quantization conditions // Journal of Mathematical Physics. — 1971. — Т. 12, № 3. — С. 343–358.
81. *Friedrich H., Wintgen H.* The hydrogen atom in a uniform magnetic field—an example of chaos // Physics Reports. — 1989. — Т. 183, № 2. — С. 37–79.
82. *Harada A., Hasegawa H.* Correspondence between classical and quantum chaos for hydrogen in a uniform magnetic field // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1983. — Т. 16, № 8. — С. L259.
83. *Gutzwiller M. C.* Chaos in classical and quantum mechanics. Т. 1. — Springer Science & Business Media, 2013.
84. *Bohigas O., Giannoni M.-J.* Chaotic motion and random matrix theories // Mathematical and computational methods in nuclear physics. — 1984. — С. 1–99.
85. *Delande D., Gay J.* Quantum chaos and statistical properties of energy levels: Numerical study of the hydrogen atom in a magnetic field // Physical review letters. — 1986. — Т. 57, № 16. — С. 2006.
86. *Monteiro T., Wunner G.* Analysis of quantum manifestations of chaos in general Rydberg atoms in strong magnetic fields // Physical review letters. — 1990. — Т. 65, № 9. — С. 1100.
87. *Hawrylak P., Grabowski M.* Hydrogenic impurity in a parabolic quantum wire in a magnetic field: Quantum chaos and optical properties // Physical Review B. — 1994. — Т. 49, № 12. — С. 8174.
88. *DeMille D.* Quantum computation with trapped polar molecules // Physical Review Letters. — 2002. — Т. 88, № 6. — С. 067901.

89. *Yelin S., Kirby K., Côté R.* Schemes for robust quantum computation with polar molecules // *Physical Review A*. — 2006. — Т. 74, № 5. — С. 050301.
90. Prospects for quantum computing with an array of ultracold polar paramagnetic molecules / М. Karra [и др.] // *The Journal of chemical physics*. — 2016. — Т. 144, № 9. — С. 094301.
91. Non-Abelian anyons and topological quantum computation / С. Nayak [и др.] // *Reviews of Modern Physics*. — 2008. — Т. 80, № 3. — С. 1083.
92. *Melezhik V. S.* New method for solving multidimensional scattering problem // *Journal of Computational Physics*. — 1991. — Т. 92, № 1. — С. 67—81.
93. Вычисления на квазиравномерных сетках / Н. Н. Калиткин [и др.] // М.: Физматлит. — 2005. — Т. 2.
94. *Abramowitz M., Stegun A. I.* Handbook of Mathematical Functions. — Washington: U.S. National Bureau of Standards, 1965. — ISBN 0-486-61272-4.
95. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. 2 изд. — БХВ-Петербург, 2011.
96. Calculus of variations / I. M. Gelfand, R. A. Silverman [и др.]. — Courier Corporation, 2000.
97. *Kolmogorov A. N.* Zur Grossenordnung des restgliedes Fourierschen Reihen differenzierbarer Funktionen // *Mathematische Annalen*. — 1935. — Т. 36. — С. 521—526.
98. *Bolda E. L., Tiesinga E., Julienne P. S.* Pseudopotential model of ultracold atomic collisions in quasi-one-and two-dimensional traps // *Physical Review A*. — 2003. — Т. 68, № 3. — С. 032702.
99. Scattering length and effective range in two dimensions: application to adsorbed hydrogen atoms / B. J. Verhaar [и др.] // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1984. — Т. 17, № 3. — С. 595.

100. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate / S. Inouye [и др.] // Nature. — 1998. — Т. 392. — С. 151.
101. Formation of Ultracold Polar Molecules in the Rovibrational Ground State / J. Deiglmayr [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Т. 101. — С. 133004.
102. Ultracold Heteronuclear Fermi-Fermi Molecules / A. Scherer, C. Voigt [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Т. 102. — С. 020405.
103. *Пуньшев В. В.* Рассеяние медленной квантовой частицы аксиально-симметричным короткодействующим потенциалом // Препринты ОИЯИ № Р4-2012-119. — 2013.
104. Observation of magnetically induced effective-mass enhancement of quasi-2D excitons / L. V. Butov [и др.] // Physical review letters. — 2001. — Т. 87, № 21. — С. 216804.
105. Quasi-two-dimensional excitons in finite magnetic fields / Y. E. Lozovik [и др.] // Physical Review B. — 2002. — Т. 65, № 23. — С. 235304.
106. *Kallin C., Halperin B. I.* Excitations from a filled Landau level in the two-dimensional electron gas // Physical Review B. — 1984. — Т. 30, № 10. — С. 5655.
107. *Drouvelis P. S., Schmelcher P., Diakonov F. K.* Global view on the electronic properties of two-electron anisotropic quantum dots // Physical Review B. — 2004. — Т. 69, № 3. — С. 035333.
108. *Haake F.* Quantum signatures of chaos. Т. 54. — Springer Science & Business Media, 2013.