

На правах рукописи

Коваль Евгений Александрович

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

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Дубна – 2017

Работа выполнена в *Лаборатории теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова Объединённого института ядерных исследований.*

Научный руководитель: **Мележик Владимир Степанович**

д. ф.-м. н., в.н.с. ЛТФ ОИЯИ

Официальные оппоненты: **Тихонова Ольга Владимировна**

д. ф.-м. н., профессор, профессор Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (физический факультет)

Коловский Андрей Радиевич

д. ф.-м. н., г.н.с. Лаборатории теории нелинейных процессов Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Ведущая организация: Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова

Защита состоится «_____» _____ 2017 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 720.001.01 при *Объединённом институте ядерных исследований (Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова)*, расположенном по адресу: *141980, г. Дубна Московской области, ул. Жолио-Кюри, д. 6*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *Объединённого института ядерных исследований.*

Автореферат разослан «_____» _____ 2017 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета

кандидат физико-математических наук *Быстрицкий Юрий Михайлович*

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования.

В последние годы активно исследуются малоразмерные квантовые системы. В частности, интерес вызывают одномерные (1D), квазиодномерные, двумерные (2D) и квазидвумерные системы [1–4]. Этому способствует быстрое развитие экспериментальных методов создания подобных систем [5–10].

В последнее время интерес к системам в двумерном (2D) пространстве инициируется благодаря широкому кругу возникающих в них эффектов и явлений, таких как: переход Березинского — Костерлица — Таулеса, дробный квантовый эффект Холла в наклонном внешнем магнитном поле [11], индуцированная магнитным полем сверхпроводимость в квазидвумерных органических проводниках [12], предсказание и открытие [13] графана, представляющего собой квазидвумерный монослой графена, связанный с атомарным водородом, и других.

В настоящее время *актуальной* является тематика анизотропных взаимодействий и её влияние на свойства систем в физике ультрахолодных газов и диатомных молекул [14], ридберговских атомов во внешних полях [10], а также в физике экситонов в полупроводниковых гетероструктурах [9], которая развивается усилиями многих международных теоретических (см. например, [1]) и экспериментальных [5, 7, 8] групп.

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 настоящее время имеются 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.

Теория двумерного рассеяния развивается, начиная с 70-х годов, многими авторами. Как следует из классических и недавних работ [15–17], 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 [15]. Кроме того, сечение рассеяния квантовой частицы на *любом* короткодействующем потенциале (включая финитные) бесконечно растет в пределе нулевой полной энергии частицы [16, 17].

Двумерному рассеянию квантовой частицы на центральном потенциале посвящено множество работ (см. [18]). Однако для анизотропных потенциалов анализ двумерного рассеяния квантовой частицы исследован в сравнительно малом числе работ (см. напр. [19]). 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 [20]. В частности, активно исследуется анизотропная сверхтекучесть [19], 2D малочастичные дипольные комплексы [21]. Недавние эксперименты с получением ультрахолодных полярных молекул в ограниченной геометрии оптических ловушек [7] 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 создание 2D материалов, таких как графен [22] (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 [5, 6].

Диполь-дипольное взаимодействие представляет интерес благодаря далекодействующему характеру взаимодействия и его 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 [23] для трехмерного пространства). Недавно достигнут заметный прогресс в анализе 2D и квази-2D рассеяния диполей. Для пороговых энергий и для энергий, допускающих квазиклассическое приближение, 2D дипольное рассеяние изучалось для случая поляризованных диполей, направленных ортогонально и под углом к нормали [19] 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 конфинментом резонансы в ультрахолодных газах в 1D и 3D оптических ловушках, появление и физика которых описывается полуаналитическими оценками (см. например [24]). 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 получением 2D и квазидвумерных систем из атомов щелочных элементов международными научными группами [6, 8]. Системы в 2D геометрии теоретически исследованы, но существующие по ним результаты часто основаны на простых моделях и получены в приближениях центральносимметричных потенциалов, в частности, потенциалов нулевого радиуса [25] 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 рас-

смаатриваемой, 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 [26]. 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 [27] и эффективного взаимодействия в экситонной паре электрон-дырка, движение которых ограничено плоскостью, в полупроводниковых 2D гетероструктурах [28]. 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 метода асимптотических итераций [29], вариационного подхода [2, 3] и аналитически для отдельных значений величины магнитного поля. *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 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.

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. [30]) 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 установлены в большом числе теоретических работ (см. напр. [30, 31]). 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 ловушках [32], систем ридберговских атомов с контролируемым дипольным взаимодействием [10] и перспективы для квантовых вычислений 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 (поляризованных 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 результа-

тов работ других авторов [19, 25] 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. Анализ и сравнение зависимостей сечений рассеяния от ориентации диполей 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 исследовательским 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 [32]. 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 [10].

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.

- Обнаружена нелинейная зависимость энергий основного и возбужденных состояний “двумерного” атома водорода и “двумерного” экситона в квантовой яме полупроводниковой гетероструктуры $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.33}\text{Ga}_{0.67}\text{As}$ 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.

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» МРАМCS-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 и 11 таблиц. Библиография включает 108 наименований на 13 страницах.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе изложены используемый нами подход для решения задачи на связанные состояния и его применение к модельной задаче, симулирующей связанные состояния квантовой двухатомной системы в двумерной геометрии оптической ловушки. Результаты первой главы опубликованы в работах [A2, A5].

В разделе 1.1 представлено описание численного алгоритма для задачи на связанные состояния. Для решения 2D уравнения Шредингера применяется вариация метода дискретной переменной, предложенная в работе Мележика В.С. [33] для решения многомерной задачи рассеяния. В качестве функций для разложения волновой функции по угловой переменной нами использованы собственные функции оператора $h^{(0)}(\phi) = \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$: функции $\xi_m(\phi) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$. Волновая функция ищется в виде разложения:

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

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 равномерной разностной сетке по угловой переменной $\phi_j = \frac{2\pi j}{2M+1}$ (где $j = 0, 1, \dots, 2M$). В представлении (1) 2D уравнение Шредингера преобразуется в систему $(2M+1)$ связанных дифференциальных уравнений второго порядка, вместе с преобразованными при разложении (1) соответствующими граничными условиями образующую краевые задачи. Для дискретизации краевых задач используется семиточечная конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности. Дискретная задача на собственные значения для проблемы связанных состояний решается с

помощью метода обратных итераций со сдвигом [34], на каждой итерации которой применяется матричная модификация алгоритма прогонки для блочно-диагональных матриц.

Преимущества используемого *алгоритма* перечислены в нижеследующих пунктах а)–г): **а)** В отличие от работ других авторов (см., например, [19]), 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; **б)** В отличие от формализма парциальных волн для используемого нами представления известна оценка ошибки аппроксимации, благодаря которой можно ожидать быструю сходимость представления дискретной переменной (1) с увеличением M на последовательности сгущающихся сеток $\{\phi_j\}_0^{2M}$, что подтверждено во всех проведенных нами вычислениях; **в)** Получаемые при этом матрицы имеют блок-диагональную структуру, позволяющие хранить их в упакованном виде и экономить ресурсы компьютера; **г)** Отсутствует необходимость вычисления матричных элементов потенциала, как это делается в работах других авторов [19], что позволяет существенно экономить расчетное время.

Применение предложенного алгоритма к модельной проблеме, симулирующей связанные состояния квантовой двухатомной системы в двумерной геометрии оптической ловушки, описано в *разделе 1.2*. Потенциал взаимодействия с ловушкой моделируется гармоническим осциллятором, а потенциал взаимодействия частиц – прямоугольным потенциалом конечной глубины. Показано, что с увеличением частоты удерживающего потенциала ловушки энергия основного состояния существенно возрастает, а энергии возбужденных состояний меняются незначительно.

Во второй главе представлен подход для численного анализа 2D квантового рассеяния на дальнодействующем сильно анизотропном рассеивателе, его

применение к модельной задаче рассеяния на круговом и эллиптическом потенциальных барьерах и исследование задачи квантового рассеяния двух неполяризованных диполей на плоскости. Результаты второй главы опубликованы в работах [A1, A4, A8].

В *разделе 2.1* показано влияние анизотропии взаимодействия на характеристики процесса рассеяния на примере модельной задачи квантового 2D рассеяния на круговом и эллиптическом потенциальных барьерах. Получено хорошее согласие численных расчетов с известной асимптотикой амплитуды рассеяния в низкоэнергетическом приближении для кругового бесконечно высокого потенциального барьера, проведено сравнение сечений рассеяния для обоих потенциалов.

Исзуемая модель описывает, например, столкновения полярных молекул в двумерной геометрии одномерных оптических ловушек. В полярных координатах потенциал взаимодействия двух произвольно направленных диполей имеет вид: $U(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma) = \frac{d_1 d_2}{\rho^3} [\sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \cos(\gamma) - 3 \sin(\alpha) \sin(\gamma) \cos(\phi) \cos(\phi - \beta)]$, где \mathbf{d}_i , ($i = 1, 2$) – дипольные моменты, 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 (см. рис. 1).

Частный случай, когда оси поляризации двух диполей сонаправлены и угол наклона к оси Z равен α ($\alpha = \gamma$; $\beta = 0$) и короткодействующее взаимодействие моделируется потенциалом бесконечно высокого барьера в нуле шириной $\rho_{HW}/D = 0.1$, рассмотрен в работе [19]. Нами изучена подобная конфигурация диполей с помощью разработанного подхода и получено хорошее согласие с результатами работы [19], что проиллюстрировано на рис. 2, где рассчитанное полное сечение рассеяния $\sigma(q, \alpha)$ представлено в единицах σ_{SC} .

В *разделе 2.2* представлены анализ и полученные результаты по 2D рассеянию неполяризованных (в отсутствие внешнего электрического поля) диполей в плоскости, моделирующему столкновения полярных молекул и атомов с боль-

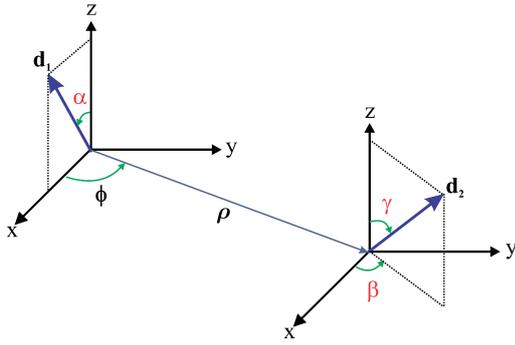


Рис. 1. Столкновение в плоскости XU двух произвольно ориентированных диполей \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2

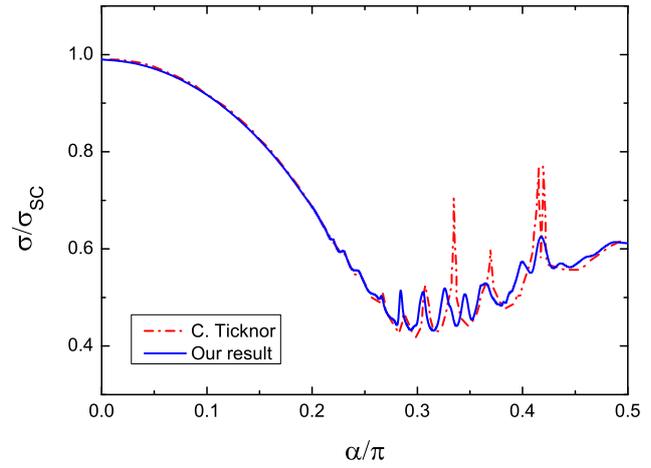


Рис. 2. Сравнение полного сечения рассеяния (в единицах σ_{SC}) с результатами работы С. Ticknor [19], вычисленного для потенциала для поляризованных диполей при $D = 1$, $Dq = 10$.

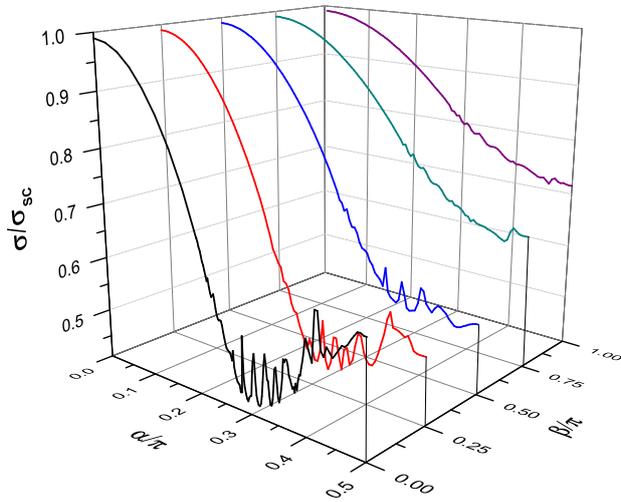


Рис. 3. Полное сечение рассеяния σ в единицах σ_{SC} как функция угла наклона $\alpha = \gamma$ диполей относительно оси Z и угла вращения β , вычисленное для потенциала $U(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma)$ при $D = 1, Dq = 10$.

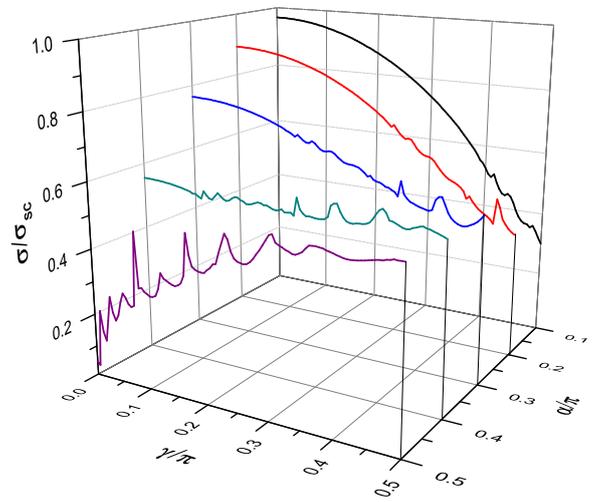


Рис. 4. Полное сечение рассеяния σ в единицах σ_{SC} как функция угла наклона α и γ , вычисленное для потенциала $U(\rho, \phi; \alpha, \beta, \gamma)$ при $D = 1, Dq = 10$. Угол вращения β фиксирован и равен $\pi/2$.

шим дипольным моментом в 2D геометрии оптической ловушки. В частности, представлен анализ изменения найденной резонансной структуры для поляризованных диполей (см. рис. 2) в вычисленной зависимости сечения рассеяния от угла наклона диполей $\alpha = \gamma$ по мере нарушения сонаправленности, моделируемого вращением угла β между плоскостями поляризации диполей Zd_1 и Zd_2 (см. рис. 1). Нами обнаружено сужение резонансной области с одновременным уменьшением амплитуды резонансных осцилляций при увеличении угла β от 0 до π (см. рис. 3). При приближении к точке $\beta = \pi$ резонансная структура исчезает, зависимость сечения 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. 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 различных частиц. Мы наблюдаем сильную зависимость полного сечения рассеяния от угла β с достижением максимума при $\beta = \pi$. Отметим, что кривые, описывающие рассеяние бозонов и фермионов, точно повторяют поведение кривой для случая различных частиц. Исследовано также рассеяние произвольно ориентированных диполей в случае взаимной ортогональности их плоскостей поляризации Zd_1 и Zd_2 ($\beta = \pi/2$). Обнаружен ярко выраженный резонансный характер рассеяния при изменении угла наклона γ одного из диполей, если другой диполь ориентирован в плоскости рассеяния XU ($\alpha = \beta = \pi/2$) (см. рис. 4), который возникает из-за усиления части диполь-дипольного взаимодействия, ответственной за притяжение, при увеличении угла наклона $\alpha \rightarrow \pi/2$.

В третьей главе численно исследованы анизотропные свойства двумерного атома водорода и двумерного экситона в наклонном магнитном поле. В отличие от выполненных ранее работ [2, 3, 29] изучаются зависимости спектра и волновых функций указанных выше систем от произвольных направлений

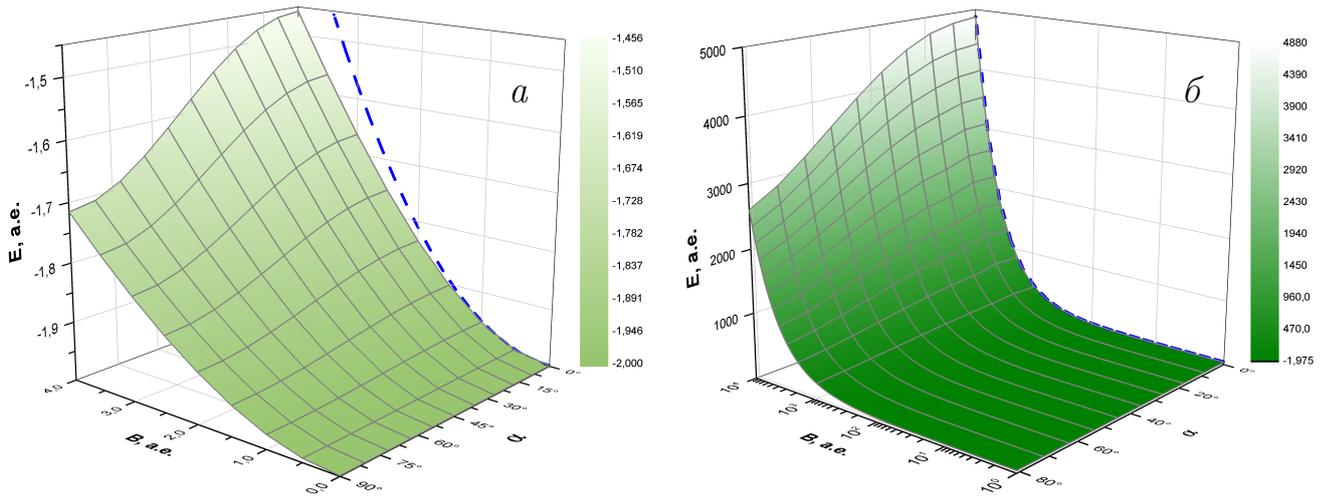


Рис. 5. Зависимости энергии основного состояния (ЭОС) 2D атома водорода от величины магнитного поля и угла наклона α к оси z направления магнитного поля с учетом конечной массы протона для диапазонов величины магнитного поля: от 0 до 4 а.е. (а) и от 1 до 10^4 а.е. (б). Штриховыми кривыми обозначены зависимости ЭОС для слабых магнитных полей $E = -2m_r + \frac{3}{64m_r^3}B^2 + \dots$ [2] (а) и сильных магнитных полей

$E = \frac{B}{2m_r} - \sqrt{\frac{\pi}{2}}B + \dots$ [2] (б), найденные по теории возмущений.

магнитного поля, составляющих угол α с нормалью к плоскости движения частиц. Результаты третьей главы опубликованы в работах [А2, А3, А7].

В разделе 3.1 приведена формулировка проблемы связанных состояний 2D атома водорода и 2D экситона в наклонном магнитном поле, проведена верификация численного алгоритма посредством сравнения с работами других авторов [2, 29] для двумерного атома водорода в приближении Борна-Оппенгеймера для магнитного поля, направленного перпендикулярно к плоскости движения частиц, получено согласие с результатами [2, 29].

В разделе 3.2 с целью более точного (с учетом конечных масс) анализа влияния величины и направления магнитного поля на спектр исследуемой системы нами рассчитаны зависимости энергии основного и первых трех возбужденных состояний 2D экситона и 2D атома водорода от угла наклона направления магнитного поля относительно нормали к плоскости движения частиц

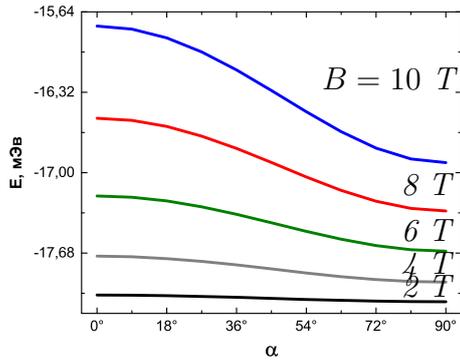


Рис. 6. Зависимость ЭОС 2D экситона в GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As от угла наклона α для величины магнитного поля B от 2 до 10 Т.

и от величины магнитного поля. На рис. 5 (а) 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. 5 (б) — для диапазона полей от 1 до 10^4 а.е.. рис. 5 (а,б) иллюстрируют обнаруженный эффект нелинейного уменьшения ЭОС: при малых магнитных полях изменение слабое, в области больших величин поля ЭОС уменьшается почти вдвое с изменением угла α от 0 до 90° . Отметим, что данные, посчитанные в приближениях Борна-Оппенгеймера и с учетом конечной массы протона, отличаются в 3-ем знаке после запятой в широком диапазоне входных расчетных данных.

Анализ полученных зависимостей рис. 5 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. Отметим согласие численных результатов с известными аналитическими результатами, рассчитанными по теории возмущений в пределах слабых и сверхсильных магнитных полей. Вычисленные при различных величинах магнитного поля (от 2 до 10 Тесла) зависимости ЭОС 2D экситона от угла наклона α , приведенные на Рис.6, аналогичны по виду зависимостям для 2D атома водорода. Значения ЭОС для $\alpha = 0^\circ$ находятся в полном согласии со значениями работ [3]. Пространственные распределения квадрата модуля волновой функции первых трех возбужденных состояний претерпевают значительную трансформацию с увеличением наклона магнитного поля. Из-за анизотропии взаимодействия про-

екция 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 $\alpha \rightarrow 90^\circ$.

В четвертой главе представлены результаты исследования статистических свойств энергетических спектров 2D атома водорода и 2D экситона в квантовой яме GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As в наклонном магнитном поле и квантового хаоса в данных системах. Результаты анализа классической динамики системы подтверждают возникновение хаоса в системе с увеличением угла наклона направления магнитного поля относительно плоскости движения частиц. Результаты четвертой главы опубликованы в работах [А3, А6].

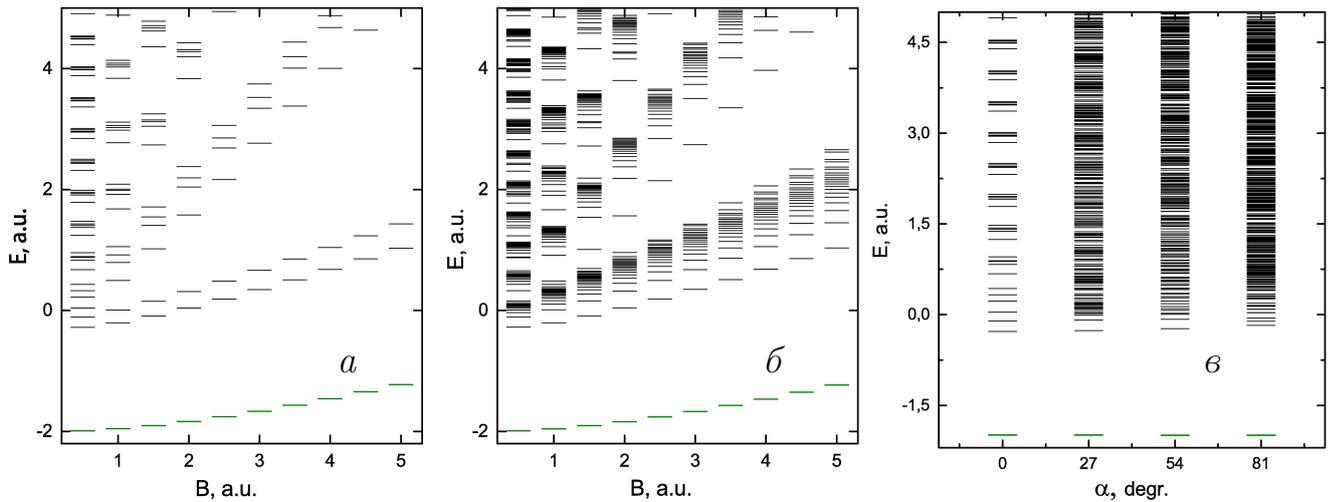


Рис. 7. Спектр двумерного атома водорода при различной величине магнитного поля, направленного перпендикулярно атомной плоскости (а), под углом $\alpha = 9^\circ$ к нормали к атомной плоскости (б), при различных углах наклона α для $B = 0.5$ а.е. (в). Основное состояние на рисунке отмечено зеленой линией.

В *разделе 4.1* исследованы статистические распределения межуровневых интервалов для различных углов наклона магнитного поля. В случае **направления магнитного поля вдоль нормали к атомной плоскости** ($\alpha = 0^\circ$) гамильтониан обладает аксиальной симметрией. Это приводит к кластериза-

ции уровней, обнаруженной нами в рассчитанном спектре и иллюстрируемой на рис. 7(а) для различных величин магнитного поля (от 0.5 до 5 а.е.). 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.. Полученные нами РМИ для $\alpha = 0^\circ$ демонстрируют хорошее согласие с Пуассоновским распределением $P(dE) = \exp(-dE)$, указывающим на преобладание регулярного движения [31] и кластеризацию уровней (функция распределения максимальна при малых значениях междууровневых интервалов). При малых углах ($\alpha \leq 10^\circ$), возбужденные энергетические уровни расщепляются, сохраняя оболочечную структуру и РМИ пуассоновского вида. При дальнейшем увеличении угла наклона α (например, $\alpha \geq 27^\circ$ обнаружено возникновение квантового хаоса, инициированного изменением направления магнитного поля и активизации анизотропной части потенциала. Квантовый хаос проявляется в отталкивании соседних уровней [31]. Подобное поведение спектра подтверждается характерным убыванием полученных нами РМИ для малых значений междууровневых интервалов dE . Изменения в энергетическом спектре также сопровождаются соответствующим изменением РМИ. Продемонстрировано хорошее согласие РМИ с характерным для режима квантового хаоса Вигнеровским распределением $P(dE) = \frac{1}{2}\pi dE \exp(-\pi dE^2/4)$ [30, 31].

В разделе 4.2 изучается динамика классической модели исследуемой системы 2D атома водорода в наклонном постоянном магнитном поле. Для наклонных магнитных полей z -проекция L_z углового момента более не сохраняется, что приводит к постепенному разрушению регулярного движения. Нами определены сечения Пуанкаре, используемые для анализа классической динамики для различных значений угла наклона магнитного поля α : $\alpha = 0^\circ, 9^\circ, 27^\circ, 54^\circ, 81^\circ$. 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. Полученные результаты показывают,

что с увеличением угла α доля хаоса в фазовом пространстве увеличивается, достигая максимума при $\alpha \rightarrow 90^\circ$. Результаты для квантового случая находятся в полном согласии с классической динамикой, что подтверждает утверждение об инициировании хаоса с увеличением угла наклона.

В Заключение сформулированы основные результаты диссертационной работы.

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. — B31.

- 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. — С. 130.

Список цитируемой литературы

1. *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.
2. *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.
3. *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.
4. *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.
5. *Martinyan K., Makhalov V., Turlapov A.* Observation of a two-dimensional Fermi gas of atoms // Physical review letters. — 2010. — Т. 105, № 3. — С. 030404.

6. *Turlapov A. V.* Fermi gas of atoms // JETP letters. — 2012. — Т. 95, № 2. — С. 96—103.
7. Quantum-state controlled chemical reactions of ultracold potassium-rubidium molecules / S. Ospelkaus [и др.] // Science. — 2010. — Т. 327, № 5967. — С. 853—857.
8. 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.
9. *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.
10. *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.
11. 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.
12. Magnetic-field-induced superconductivity in a two-dimensional organic conductor / S. Uji [и др.] // Nature. — 2001. — Т. 410, № 6831. — С. 908.
13. Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane / D. C. Elias [и др.] // Science. — 2009. — Т. 323, № 5914. — С. 610—613.
14. The physics of dipolar bosonic quantum gases / T. Lahaye [и др.] // Rep. Prog. Phys. — 2009. — Т. 72. — С. 126401.
15. *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.
16. *Lapidus I. R.* Quantum-mechanical scattering in two dimensions // American Journal of Physics. — 1982. — Т. 50, № 1. — С. 45—47.

17. *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.
18. *Friedrich H.* Scattering theory. Т. 872. — Springer, 2013.
19. *Ticknor C.* Two-dimensional dipolar scattering with a tilt // *Physical Review A*. — 2011. — Т. 84, № 3. — С. 032702.
20. *Bloch I., Dalibard J., Zwirger W.* Many-body physics with ultracold gases // *Reviews of modern physics*. — 2008. — Т. 80, № 3. — С. 885.
21. *Cremon J. C., Bruun G. M., Reimann S. M.* Tunable Wigner states with dipolar atoms and molecules // *Physical review letters*. — 2010. — Т. 105, № 25. — С. 255301.
22. *Novoselov K. S.* Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland // *Reviews of Modern Physics*. — 2011. — Т. 83, № 3. — С. 837.
23. *Melezhik V. S., Hu C.-Y.* Ultracold atom-atom collisions in a nonresonant laser field // *Physical review letters*. — 2003. — Т. 90, № 8. — С. 083202.
24. *Petrov D. S., Shlyapnikov G. V.* Interatomic collisions in a tightly confined Bose gas // *Phys. Rev. A*. — 2001. — Т. 64. — С. 012706.
25. Two cold atoms in a harmonic trap / Т. Busch [и др.] // *Foundations of Physics*. — 1998. — Т. 28, № 4. — С. 549—559.
26. 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.
27. *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.

28. *Parfitt D. G. W., Portnoi M. E.* The two-dimensional hydrogen atom revisited // *Journal of Mathematical Physics*. — 2002. — Т. 43, № 10. — С. 4681—4691.
29. *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. — Т. 15, № 06. — С. 1263—1271.
30. *Gutzwiller M. C.* Chaos in classical and quantum mechanics. Т. 1. — Springer Science & Business Media, 2013.
31. *Bohigas O., Giannoni M.-J.* Chaotic motion and random matrix theories // *Mathematical and computational methods in nuclear physics*. — 1984. — С. 1—99.
32. *DeMille D.* Quantum computation with trapped polar molecules // *Physical Review Letters*. — 2002. — Т. 88, № 6. — С. 067901.
33. *Melezhik V. S.* New method for solving multidimensional scattering problem // *Journal of Computational Physics*. — 1991. — Т. 92, № 1. — С. 67—81.
34. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. 2 изд. — БХВ-Петербург, 2011.