

Антиферромагнитный Вигнеровский кристалл и модель квантового димера

Алексей Кашуба
ИТФ Ландау, Москва
akashuba@itp.ac.ru

6 октября 2004 г.

1 Введение.

Недавние исследования продемонстрировали возможность создания системы на основе спиновой решетки с гамильтонианом, низкоэнергетический спектр которой совпадает со спектром гамильтонианом квантового димера. Строение обычных антиферромагнетиков, однако, не позволяет нам произвольно менять параметры спинового взаимодействия и конфигурацию решетки. В связи с этим возникла необходимость создания "искусственного" антиферромагнетика параметры которого, мы могли бы менять в широких пределах.

Цель данной работы - исследовать возможность построения двумерного антиферромагнитного электронного кристалла на поверхности гелия, такого что электроны находятся в узлах заданной решетки и взаимодействуют в соответствии с гамильтонианом Гейзенберга:

$$\hat{H} = \sum_{ij} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j. \quad (1)$$

Величины J_{ij} должны быть положительны и достаточно велики, так чтобы температурные флуктуации не разрушали спиновый порядок кристалла. Мы будем строить такую систему, беря за основу Вигнеровский кристалл. В антиферромагнитных кристаллах обычно реализуется га-

мильтониан Хаббарда:

$$\hat{H} = \sum_{ij} I_{ij} (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2)$$

Гамильтониан Гейзенберга получается при рассмотрении второго порядка теории возмущений, если возмущением считать переброс электрона с узла на узел. В такой модели величины J_{ij} имеют порядок $J \sim I^2/U$ [3].

Для того чтобы смоделировать кристалл с гамильтонианом Хаббарда необходимо удовлетворить следующим условиям:

1. Обменное взаимодействие в кристалле должно быть достаточно велико;
2. В данной системе должны превалировать двухчастичные взаимодействия;
3. Разность энергий двух электронов на узле с одинаковыми и разными спинами должна быть положительной и много большей характерной величины обменных интегралов I_{ij} ;
4. Энергия локализации электрона должна быть достаточно велика чтобы кристалл не разрушался за счет термодинамических флуктуаций.

Разберемся, каким именно образом мы могли бы реализовать данные условия. Как обычный Вигнеровский кристалл, в котором электроны взаимодействуют по закону Кулона, так и система со сплошной проводящей подложкой, которая частично экранирует кулоновское взаимодействие, превращая его в диполь-дипольное, условиям, сформулированным выше, не удовлетворяют [1, 4], поскольку в таких кристаллах всегда будут превалировать трехчастичные обмены. Кроме того, обменное взаимодействие будет мало [1, 4]. Тот факт, что трехчастичные обмены являются главными, может быть объяснен с помощью оценки интегралов по траекториям, через которые выражаются обменные интегралы. Для простоты будем рассматривать квазиклассическое движение электронов. Потенциальная энергия $V(X)$ обусловлена лишь электрон-электронным взаимодействием. Будем считать, что $E \ll V_0$, где V_0 - характерная энергия взаимодействия между электронами (для системы без подложки $V_0 = \frac{e^2}{D}$, где D - среднее расстояние между электронами, с проводящей подложкой - $V_0 = \frac{e^2 z^2}{D^3}$, где z - расстояние от электрона до подложки). Тогда для N -частичного обмена действие можно оценить как $S \approx M S_1$, где M - количество вовлеченных в процесс обмена электронов, т.е. электронов которые во время обмена сдвигаются со своих положений равновесия

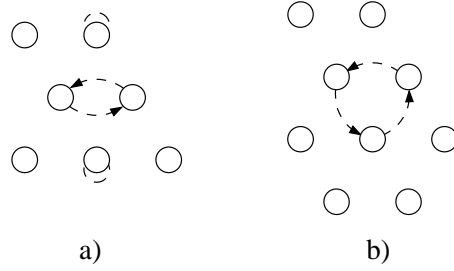


Рис. 1: Обмены в Вигнеровском кристалле. Движение электронов, совершающих обмен, затрагивает соседние электроны. **а** Двухчастичный обмен сильно затрагивает еще два соседних электрона. **б** Трехчастичный обмен слабо затрагивает соседние электроны.

на расстояния порядка D . В общем случае $M \geq N$, а $S_1 \sim \sqrt{mV_0D^2}$ - эффективное действие соответствующее переходу в узла на узел одного электрона. Для межэлектронных взаимодействий типа $1/r^n$, где n варьировалось от 1 до 12, получалось для $N = 2 M \approx 4$, минимальное значение $M \approx 3$ соответствовало $N = 3$ [1] (см. рис. 1).

Проблему доминирования трехчастичных процессов, однако, можно решить, добавив в систему некоторый статический потенциал, который будет иметь ту же симметрию, что и кристалл, и те же характерные размеры, таким образом, заодно стабилизируя его. В этом случае действие примет вид $S \approx \tilde{M}\tilde{S}_1 + NS_0$. Задача состоит в том, чтобы построить потенциал, для которого U_0 стало больше \tilde{V}_0 (в идеальном случае $U_0 \gg \tilde{V}_0$), т.е. чтобы в системе доминировало бы двухчастичное взаимодействие, но с другой стороны, сохраняя отношение вкладов в действие необходимо существенно понизить само действие, в частности за счет сильного понижения вклада отвечающего за межэлектронное взаимодействие.

2 Устройство системы и условия применимости гамильтониана Хаббарда

Мы будем исследовать электронный кристалл с подкладкой состоящей из плотно упакованных островков в виде шестиугольников с узкими зазорами между ними. Сама подложка погружена в жидкий гелий на некоторую глубину (см. рис. 2). Поверхностные электроны находятся над металлическими пластинками, имея там минимум потенциальной энергии,

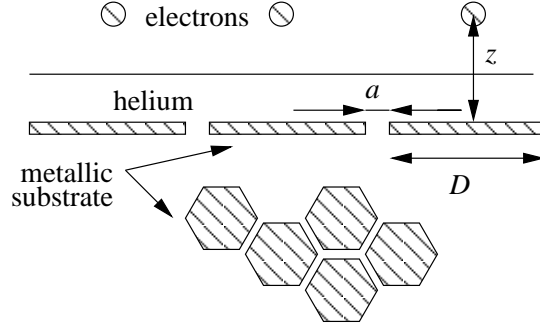


Рис. 2: Структура подкладки, состоящей из шестиугольных пластинок, погруженной в жидкий гелий. Над каждой из пластинок находится в среднем один электрон.

обусловленный полем изображения. Кроме того, электрон находящийся над пластинкой делокализован по всему шестиугольной пластинке. Переходу электрона с одной пластины на другую препятствуют два фактора: барьер, создаваемый щелью между пластинками и электростатическое отталкивание того электрона, который уже находится на другой пластинке. Это обстоятельство объясняет, почему была взята именно такая форма подкладки и почему щели между пластинками должны быть узкими - при невыполнении этих условий вклад в действие за счет статического потенциала сильно возрастет и обменный интеграл станет чересчур маленьким.

Применение статического потенциала позволяет добиваться достаточно больших обменных интегралов, в отличие от обычного Вигнеровского кристалла, у которого электрон-электронное взаимодействие либо слишком велико, что приводит к чрезвычайно малым обменным интегралам, либо же оно, наоборот, недостаточно велико для поддержания дальнего порядка, и кристалл плавится. Наличие же указанной подложки в случае малых электрон-электронных взаимодействий, уменьшение которых достигается за счет уменьшения поверхностной плотности электронов, при которых бы обычный Вигнеровский кристалл расплавился, приводит к тому, что электроны стремятся находиться на пластинках и дальний порядок не исчезает. Вклад в действие осуществляемый этим взаимодействием можно оценить как $S \sim \sqrt{me^2 z_0^2 / D} \sim 1$ при $D \sim 1000 \text{ \AA}$. Слегка увеличивая D , мы можем легко уменьшить этот вклад, не сильно понизив обменный интеграл (в выражении для него D входит только в

предэкспоненту).

2.1 Локализация электрона в направлении, перпендикулярном поверхности гелия

Электроны, расположенные над поверхностью гелия, притягиваются к ней за счет зарядов-образований индуцируемых на металлической подложке. Вдобавок, для создания необходимой концентрации поверхностных электронов к электронному газу прикладывается электрическое поле. Кроме прижимающего электрического поля сам электронный газ создает электрическое поле, которое можно оценить как $4\pi e/\sqrt{3}D^2$ (в случае когда основная масса электронов находится в приповерхностных состояниях). Для расчетов мы примем, что поверхностные электроны находятся в потенциале

$$U(x) = -\frac{e^2}{2(x+z_0)} + eE_{\perp}x + \begin{cases} V_0, & x < 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases} \quad (3)$$

где z_0 - глубина погружения подложки в гелий, а $V_0 \approx 1eV$ [5]. Среднее расстояние от поверхности гелия, на котором будет находиться электрон будет иметь порядок $z - z_0 \sim z_0 \left(\frac{\hbar^2}{me^2z_0}\right)^{1/3}$, а энергия такого состояния - $E \sim \frac{e^2}{z_0} \left(\frac{\hbar^2}{me^2z_0}\right)^{1/3}$ (см. приложение А). Для значений $z_0 \sim 50\text{\AA}$ мы получим энергии порядка $0.05eV$, что много меньше $1eV$. С другой стороны, поле изображения около e/z_0^2 , а поле электронного облака $\sim e/D^2$ что много меньше поля изображения, поскольку $z_0 \ll D$. Отсюда видно, что приближение, использованное при оценке величин z и E верно.

2.2 Устойчивость поверхности гелия

Очевидно, что приповерхностные состояния не являются устойчивыми, так как электрон может протуннелировать сквозь слой гелия прямо на подложку. Вероятность протуннелировать равна e^{-S} , где $S \sim \sqrt{mV_0z_0^2/\hbar^2}$, что много меньше единицы, и, соответственно, пренебрежимо мала, однако это не единственный фактор, нарушающий стабильность электронного кристалла. Сам кристалл создает электрическое поле равное $4\pi e/\sqrt{3}D^2$, которое способствует переходу электрона на подложку. Вероятность электрона протуннелировать по-прежнему остается малой, однако, при силь-

ных полях и высоких плотностях электронного слоя сама поверхность гелия становится неустойчивой. Экспериментальные данные указывают на то, что минимальное расстояние между электронами, при котором начинаются массовые проникновения электронов в гелий имеют порядок $D \sim 1000 \text{ \AA}$, что соответствует полям $E \sim 30 CGSE$ [6, 7]. При большой плотности электроны прогибают поверхность гелия и в толще гелия возникает пузырек, заполненный электронами - баблон. В среднем баблон содержит около $10^7 \div 10^8$ электронов [8]. Радиус баблона, соответственно, $r \sim \sqrt[3]{\frac{N^2 e^2}{16\pi\tau}} \sim 10^{-2} \div 10^{-3} \text{ cm}$, где τ - поверхностное натяжение гелия, а N - количество электронов в баблоне. Сосчитать критическое поле можно, рассматривая волны распространяющиеся по поверхности гелия - рипплон. Дисперсионное соотношение для рипплон выглядит следующим образом:

$$\omega^2 = \left(\rho g + \tau k^2 - \frac{(2\pi e n)^2 + E_{\perp}^2}{2\pi} |k| \right) \frac{|k|}{\rho}, \quad (4)$$

где ρ - плотность гелия, E_{\perp} - внешнее электрическое поле, g - ускорение свободного падения, а n - поверхностная плотность электронов. Согласно этой формуле, критическая плотность электронов $n_c \approx 10^9 \text{ cm}^{-2}$, а критическое поле $E \sim 10 CGSE$ [7, 9].

Существует, однако, возможность увеличить величины допустимых электрического поля и электронной плотности. Все вышеприведенные рассуждения были приведены для случая толстого слоя гелия. Ввиду того, что радиус баблона очень велик, тонкая пленка гелия оказывается гораздо более устойчивой к воздействию электрического поля. Гидродинамический анализ показывает, что такая система устойчива вплоть до значений плотности 10^{11} cm^{-2} , что соответствует полям $E \sim 200 \text{ kV/cm}$ [7]. Экспериментально достигнута электронная плотность $n \sim 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ и поле $E \sim 2 \times 10^4 \text{ V/cm}$ [10].

2.3 Режимы работы системы

Ввиду того, что электроны все-таки время от времени туннелируют в гелий, их концентрация над поверхностью гелия со временем уменьшается. Для поддержания необходимой концентрации электронов установка обычно переводится в режим насыщения - когда вдали от поверхности гелия электрическое поле стремится к нулю. В этом случае, разместив в

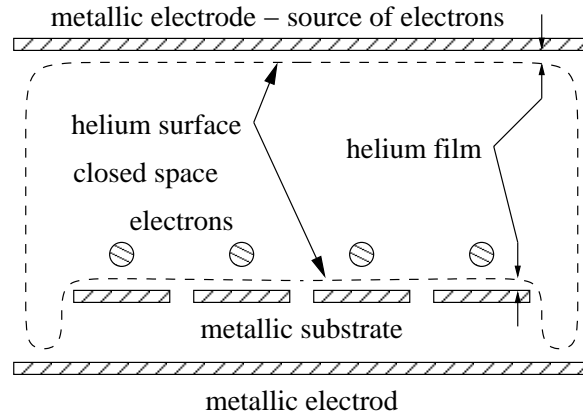


Рис. 3: Схема прибора. Жидкий гелий находится в замкнутом пространстве, что приводит к тому что верхний электрод, являющийся источником электронов, оказывается покрытым слоем жидкого гелия. Металлическая подкладка приподнята над дном емкости с гелием, что приводит к утончению пленки гелия на металлической подкладке из шестиугольных пластинок, под которой находится еще один электрод, который может использоваться как для создания ослабляющего поля, так и для дополнительного экранирования (см. раздел 3).

верхней части прибора металлический электрод, поставляющий электроны в пространство над поверхностью гелия, можно поддерживать требуемую поверхностную концентрацию электронов (см. рис. 3). Ввиду того, что гелий сверхтекучий, верхний электрод будет также покрыт пленкой гелия, однако, из-за собственного веса гелия, эта пленка будет гораздо тоньше чем на подложке, и электроны будут туннелировать сквозь верхнюю пленку гораздо чаще, чем сквозь нижнюю.

Несмотря на удобство режима насыщения, находясь в нем, невозможно перевести большую часть электронов в основное приповерхностное состояние вследствие того, что при конечной температуре статсумма для кулоновского потенциала расходится. При расчетах статсумму необходимо обрезать на длине свободного пробега электронов, поскольку на расстояниях больших, чем длина свободного пробега можно считать, что электроны находятся в непрерывной части спектра. Тем не менее, статсумма остается слишком большой, и мы не можем понижая температуру, перевести все электроны в основное состояние (см. приложение В). Нас же интересует случай, когда количество электронов, находящихся в

основном состоянии практически достигает суммарного количества электронов над поверхностью гелия. Такое требование необходимо для того, чтобы вероятность того, что электрон из пространства над гелием заменит электрон, находящийся в основном состоянии на пластинке, была мала. В этом случае можно считать, что спин электрона на пластинке не изменяется и полностью пренебречь наличием не поверхностных электронов.

Эту проблему можно решить наложением электрического поля, прижимающего электроны к поверхности гелия. Как показано в приложении В, при полях $E_{\perp} \gg \frac{T^2}{e^3} e^{-e^2/z_0 T}$ вероятность обнаружить электрон в основном состоянии стремится к единице. Для оценки верхней границы минимального поля можно рассмотреть классическое движение электрона [11] и, пренебрегая кулоновским взаимодействием электрона с собственным изображением, убедиться в том, что среднее расстояние от поверхности до электрона равно T/eE_{\perp} . Требуя, чтобы это расстояние было много меньше z_0 , получим, что верхняя граница для минимального поля - T/ez_0 .

Достоинства обоих режимов можно совместить ввиду следующего факта: характерное время существования режима с прижимающим полем - $10^{-4} \div 10^{-5} \text{ sec}$ (электроны все-таки понемногу туннелируют в гелий, и количество поверхностных электронов, хоть и медленно, но уменьшается), что гораздо больше характерного времени электронного обмена в системе [12]. При этих условиях имеет смысл сначала ввести систему в режим насыщения, создав необходимую электронную плотность, а после этого включить прижимающее поле, приводя систему в рабочее состояние.

2.4 Стабильность системы и модель Хаббарда

Поскольку мы хотим использовать модель Хаббарда, то нам необходимо удовлетворить условиям этой модели. Мы несколько усложненную модель (см. приложение D), когда два электрона могут находиться в одном и том же узле, в одинаковом спиновом состоянии. Это обобщение не повлияет на результат, поскольку энергия двух электронов на одном узле всегда выше, если их спины параллельны (см. приложение C). Кроме условий налагаемых моделью Хаббарда, мы также потребуем, чтобы эффективное взаимодействие $U_{eff} = (U_0^{-1} - U_1^{-1})^{-1}$ было не слишком

велико, чтобы не слишком понизить энергию эффективного спинового взаимодействия электронов.

Мы также хотим добиться стабильности системы при конечных температурах. Чтобы термодинамические флуктуации не влияли на состояние электрона, необходимо чтобы разность энергии основного и первого возбужденного уровней была гораздо больше температуры. Учитывая, что энергия электрона на пластинке близка к $2\mu_n^2\hbar^2/mD^2$, где μ_n - n -ый нуль функции Бесселя, получим условие $50\hbar^2/mD^2 \gg T$.

Считая, что температура системы $T \sim 1 K$ и взяв диаметр пластинки $D \sim 1000 \text{ \AA}$ и ширину щели $z_0 \sim 40 \text{ \AA}$, мы получим энергию возбуждения $E_1 - E_0 \sim 5 K$, эффективную энергию взаимодействия на узле $U_{eff} \sim 0.8 K$, и среднюю потенциальную энергию взаимодействия электронов $U_{pot} \sim 0.3 K$.

3 Вычисление обменных интегралов и энергии спинового взаимодействия интегралов

Рассмотрим теперь сам процесс обмена. Электрон переходит на соседнюю пластинку, где он находится вместе с электроном который там уже был, время порядка \hbar/U_{pot} , а потом другой электрон туннелирует на пустую пластинку. Такой процесс как раз соответствует второму порядку теории возмущений. В нашей задаче параметры получаются такими, что имеет место ситуация более близкая к случаю сильного взаимодействия электронов, когда $U_{pot} \sim e^2 z^2 / D^3$. Этот случай описан в приложении С.2, см. также раздел 2.4.

Обменные интегралы в нашей задаче связаны с туннелированием электрона с узла на узел, ввиду чего они экспоненциально малы: $I = I_0 e^{-S}$, где $S \gg 1$ - подбарьерное действие, соответствующее движению электрона с одной пластинки на другую [1, 2]:

$$S = \int_0^L \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |U(x) - E|} dx,$$

где L - длина подбарьерной траектории, E - энергия электрона, $U(x)$ - потенциал барьера.

Нас интересует энергия спинового взаимодействия электронов $J \sim |I|^2/U = (I_0^2/U) e^{-2S}$. Произвести точный расчет I невозможно, поэтому

мы оцениваем J по порядку величины. Как будет показано в параграфе 3.1, $I_0 \sim 10\hbar^2/mD^2$. Эффективная же энергия взаимодействия U_{eff} (см. раздел 2.4 и приложение С) равна $U_{pot}(U_{pot}+K)/K$, где $K = \hbar^2/mD^2$. Ввиду выше сказанного,

$$J = J_0 e^{-2S}, \quad \text{где} \quad J_0 \sim 100 \frac{K^3}{U_{pot}(U_{pot} + K)}. \quad (5)$$

В результате расчет J сводится к вычислению S .

При подборе параметров задачи, таких как a , z и D , для нахождения наибольших обменных интегралов, мы должны удовлетворить еще нескольким важным условиям. Одна из главных идей создания описываемого кристалла - избавиться от межэлектронного взаимодействия. Для этого необходимо чтобы вклад в действие от e - e взаимодействия был меньше, чем вклад, связанный с туннелированием через барьер. Это приводит к неравенству $z^3/a^2D \ll 1$. Кроме этого, желательно чтобы энергия электрона на пластинке была достаточно велика, чтобы электрон был делокализован по всей пластинке, и туннелирование происходило бы через барьер создаваемый в основном щелью.

3.1 Обменный интеграл в простейшем случае

Как было упомянуто выше, при переходе электрона из одной пластинки на соседнюю, основной вклад в действие происходит при подбарьерном движении, поэтому действие можно считать равным

$$S = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx = \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}} \int_0^{x_0} \sqrt{U(x) - E} dx, \quad (6)$$

где $U(x)$ - симметричный потенциал щели, а x_0 - точка поворота. Суммарное же время движения определяется временем движения по пластинкам, поэтому предэкспонента в выражении для I примерно равна энергии электрона на пластинке. Учитывая, что энергия электрона на пластинке существенно меньше высоты барьера $U(x)$, в случае, когда интеграл сходится, энергией E в подынтегральном выражении можно пренебречь и распространить интегрирование до бесконечности:

$$S = \sqrt{\frac{8m}{\hbar^2}} \int_0^{\infty} \sqrt{U(x)} dx$$

В данном параграфе мы рассмотрим ситуацию, когда подложка не заземлена, т.е. имеет постоянный заряд. В таком случае задача о нахождении потенциала $U(x)$ сводится к задаче о взаимодействии электрона с бесконечной металлической плоскостью с щелью.

Для полноты рассмотрим сначала случай широкой щели ($a \gg z$). Нас этот случай будет интересовать меньше, поскольку он подразумевает большее значение действия, чем противоположный случай. Для решения можно рассмотреть взаимодействие электрона с металлической полуплоскостью, а потом обрезать интегрирование на половине ширины щели (см. приложение Е.2). Энергией электрона здесь также можно пренебрегать, поскольку со стороны пластинки интеграл сходится, а расходимость на другом конце оси интегрирования никак не связана с ненулевым значением энергии. В этом случае действие равно

$$S = \sqrt{\frac{2me^2z}{\hbar^2}} \left(\Lambda - \frac{1}{\pi} \log \Lambda + C \right), \quad (7)$$

где $\Lambda \approx a/2z$ - обрезка интеграла, а $C \approx 0.29$.

Гораздо более интересен случай, когда ширина щели мала ($a \ll z$). В этом случае можно показать (см. приложение Е.1) что щель в подложке создает для электрона потенциал, равный

$$U(x) = \frac{3}{8} \frac{e^2 z^2 a^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}}. \quad (8)$$

Поскольку потенциал барьера спадает с расстоянием как $1/x^5$, и интеграл соответственно сходится, то при вычислении действия энергией можно пренебречь. Действие в результате равно

$$S = \sqrt{\frac{3me^2a^2}{\hbar^2z}} \int_0^\infty (1+x^2)^{-5/4} dx.$$

Подсчитав интеграл численно, мы получаем

$$S = C \sqrt{\frac{me^2a^2}{\hbar^2z}}, \quad \text{где } C = \sqrt{3} \int_0^\infty (1+x^2)^{-5/4} dx \approx 2.07. \quad (9)$$

Энергия спинового взаимодействия соответственно равна

$$J \sim J_0 \exp \left(-4.14 \frac{a}{\sqrt{r_B z}} \right), \quad (10)$$

где $r_B = \hbar^2/me^2$ - радиус Бора.

К сожалению, при такой постановке задачи спиновое взаимодействие оказывается чересчур маленьким - даже максимальное значение J (при $a = 10\text{\AA}$, $D = 500\text{\AA}$, $z = 60\text{\AA}$) достигает величин энергий лишь порядка $10^{-4}K$.

3.2 Уменьшение действия

Предэкспонента в выражении для обменного интеграла достигает значений порядка $1K$ лишь при $z \sim 30\text{\AA}$, $D = 500\text{\AA}$, а при таких значениях z действие S становится порядка 10. Это означает, что нам необходимо научиться уменьшать действие именно на таких масштабах. Тут есть два пути - уменьшение высоты барьера и уменьшение его толщины. Оба способа имеют свои преимущества и недостатки, но возможно, что их одновременное применение позволит добиться необходимых значений J при правдоподобных значениях параметров.

3.2.1 Ослабляющее поле

Один из способов изменять барьер, создаваемый щелью - задать подложке определенный потенциал. Это приведет к тому, что электростатическое поле с разных сторон подложки будет разное. В дальнейшем, то поле, что над подложкой, мы будем называть прижимающим (E_{\perp}), а то которое под ней - ослабляющим (E_r). Разность электростатических полей приводит к перераспределению поверхностных зарядов на краях щели. В результате в окрестности щели возникнет добавочный потенциал [13]

$$U_1(x) = -e(E_r - E_{\perp}) \frac{za^2}{16(x^2 + z^2)} \quad (11)$$

(см. также дополнение Е.1.1). Нас интересует случай $E_r > E_{\perp}$, когда поле ослабляет барьер, "утапливая" его как показано на рис. 4. Наличие ослабляющего поля приводит не только к уменьшению высоты барьера, но, что более существенно, уменьшает его толщину. Кинетической энергией по-прежнему можно пренебречь, однако интеграл теперь надо брать на отрезке $[-x_0, x_0]$, где $x_0 = z\sqrt{\alpha^{-2/3} - 1}$, $\alpha = (E_r - E_{\perp})z^2/6e$.

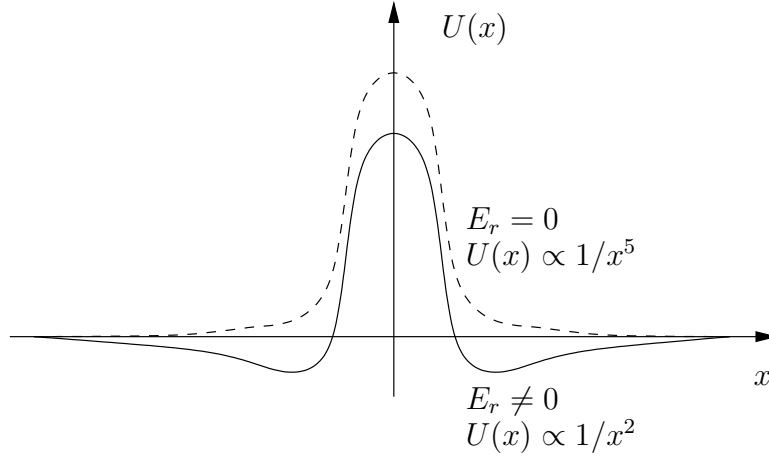


Рис. 4: Изменение потенциала при наложении ослабляющего поля. Пунктирная линия - профиль потенциала в отсутствие поля. Сплошная линия - поле "вдавливает" барьер, что приводит как к уменьшению высоты барьера, так и уменьшению расстояния между точками поворота.

Действие же примет вид

$$S = \sqrt{\frac{3me^2a^2}{4\hbar^2z}} \int_{-\sqrt{\alpha^{-2/3}-1}}^{\sqrt{\alpha^{-2/3}-1}} \sqrt{\frac{1}{(1+x^2)^{5/2}} - \alpha \frac{1}{1+x^2}} dx.$$

Введя функцию

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \sqrt{3} \int_0^{\sqrt{\alpha^{-2/3}-1}} \sqrt{(1+x^2)^{-5/2} - \alpha(1+x^2)^{-1}} dx = \\ &= \sqrt{3} \int_0^{\operatorname{arccosh}(\alpha^{-1/3})} \sqrt{\cosh^{-3}t - \alpha} dt, \end{aligned}$$

график которой представлен на рис. 5, действие можно переписать в виде:

$$S = \sqrt{\frac{me^2a^2}{\hbar^2z}} f(\alpha) \quad (12)$$

При α , близкому к единице, функция $f(\alpha)$ равна

$$f(\alpha) \approx \sqrt{3} \int \sqrt{1-\alpha-3t^2/2} dt = \frac{\pi(1-\alpha)}{2\sqrt{2}}$$

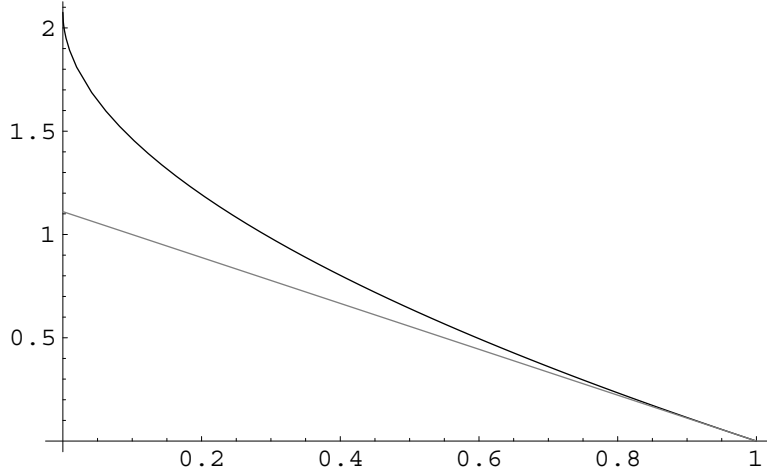


Рис. 5: График функции $f(\alpha)$. Черная кривая - численно посчитанное значение функции. Серая - аппроксимация при $\alpha \rightarrow 1$.

Недостаток этого метода состоит в том, что для того чтобы добиться нужного значения действия, необходимы чрезвычайно большие поля, которые не только сложно создать, но и которые будут приводить к дестабилизации поверхности гелия.

3.2.2 Дополнительное экранирование

Суть второго способа заключается в том, чтобы ослабить потенциал барьера за счет дополнительного экранирования электрона в момент его прохождения над щелью. Для этого под подкладку, состоящую из шестиугольных пластинок, подкладывается еще одна сплошная подложка (см. рис. 6). Если расположить вторую подкладку на расстоянии d много меньшем z , то высота барьера сильно уменьшится. Сосчитать потенциал узкой щели становится весьма трудно, поэтому мы ограничимся оценкой действия в случае широкой щели. Действие по порядку величины равно $S_0 \sim \sqrt{mUa^2/\hbar^2}$. Высота барьера теперь $U = e^2/2z - e^2/2(z+d)$, и действие уменьшается:

$$S \sim S_0 \sqrt{1 - z/(z+d)}. \quad (13)$$

При $z \gg d$ уменьшение действия становится большим: $S \sim S_0 \sqrt{d/z}$. Для узкой щели такой расчет не производился, но качественно явление не

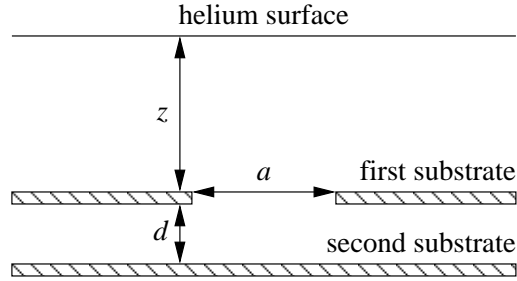


Рис. 6: Расположение сплошной дополнительной подложки, которая может использоваться как для дополнительного экранирования, так и для создания ослабляющего электрического поля.

изменится - вторая подложка при маленьких d будет сильно понижать барьер. При всем удобстве этого способа необходимо не забывать о меж-электронном взаимодействии, которое должно давать меньший вклад в действие, чем барьер, создаваемый щелью, для того чтобы в системе доминировали двухчастичные обменные процессы.

4 Модель квантового димера и ее применения

Димер на треугольной решетке выглядит следующим образом. Представим себе треугольную решетку, у которой каждый узел связан только с одним из шести соседних узлов (см. рис 7а). Поскольку вариантов соединения узлов очень много, то соответственно основное состояние такой системы является сильно вырожденным. Гамильтониан квантового димера также предусматривает переходы между этими состояниями: две связи находящиеся на противоположных сторонах ромба, который является элементарной ячейкой решетки, могут перескочить на две другие его стороны (см. рис. 7b).

Квантовые димеры интересны тем, что с их помощью можно построить управляемый квантовый бит. Основная проблема экспериментальной реализации кубитов состоит в том, что они сильно подвержены внешним воздействиям, которые разрушают состояние кубита, приводя к потере информации. Модель кубита основанная на решетке димера позволяет обойти эту трудность. Представим себе двусвязную область сделанную

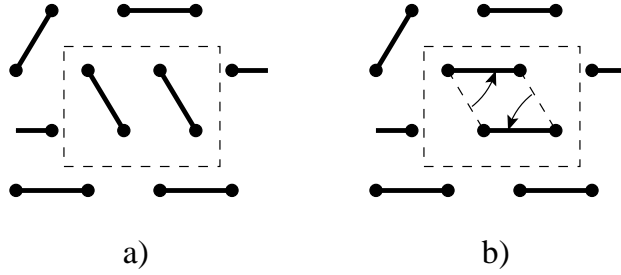


Рис. 7: Возможные состояния димера. **а** Расположение связей до перескока. **б** Расположение связей после перескока. Пунктирной линией выделены связи совершающие перескок.

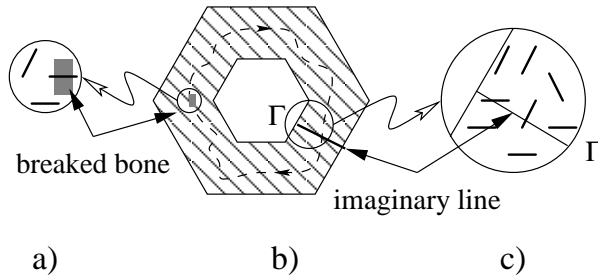


Рис. 8: Структура управляемого кубита. **а** Разрываемая связь, которая приводит к образованию квазичастицы. **б** Неодносвязная область из решетки димера. Пунктирная линия изображает путь пройденный квазичастицей. **с** Линия Γ - воображаемая линия, на которой считается количество связей.

из решетки димера. Проведем воображаемую линию Γ связывающую обе границы области. Эта линия будет пересекать какое-то количество связей находящихся на ребрах решетки (см. рис. 8b,c). Легко заметить, что переходы решетки из одного состояния в другое, допускаемые в рамках модели квантового димера, не меняют четность числа связей пересекаемых этой воображаемой линией. Более того, если вдруг в какой-то области такого кубита возникнет некоторое локальное возмущение, которое изменит его состояние, или даже заставит систему покинуть пространство состояний димера, то после релаксации четность числа пересекаемых связей останется прежней. Это свойство как раз и придает ценность такой системе, поскольку внешние воздействия в основном создают возмущения носящие локальный характер. Задав линию Γ , мы можем разбить пространство состояний кубита на два подпространства - с четным

и нечетным числом связей, пересекаемых этой линией. Эти два подпространства и будут соответствовать двум состояниям кубита (0 и 1) [14].

Кроме измерения состояния кубита, необходим также способ управлять им, т.е. переводить из состояния 0 в состояние 1 и наоборот. Переходы между этими состояниями можно реализовать следующим образом. Если мы разорвем какую-то связь, то система покинет пространство состояний димера, и вследствие этого связи получают возможность перемещаться. В результате, в димере возникнет возбуждение - квазичастица чем-то сходная по свойствам с дыркой в полупроводнике. Если мы разорвем связь на короткое время, то созданная флуктуация тут же релаксирует. Однако, если мы продержим связь разорванной достаточно длительное время, то до того как эта квазичастица релаксирует, она может обогнуть внутреннюю границу области, и такой процесс приведет к изменению четности числа связей пересекаемых линией Γ , т.е. кубит перейдет из одного своего состояния в другое (см. рис. 8a,b).

4.1 Электронный кристалл и модель квантового димера

Существует несколько проектов по физической реализации модели квантового димера. Нас интересует способ, в котором предлагается за физическую основу димера взять спиновую решетку с треугольной симметрией [15]. Эту систему спинов можно представить в виде треугольной решетки (см. рис. 9a), каждое ребро которой состоит из четырех спинов взаимодействующих между собой (см. рис. 9b). Энергия взаимодействия спина на узле решетки и спина находящегося на ее ребре равна $J_2(\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, а двух спинов находящихся на ребре: $J_1(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)})$. Гамильтониан такой системы равен [15]:

$$H^{(0)} = \sum_{\langle aa' \rangle} J_2(\mathbf{S}_{aa'} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{aa'}) + \frac{J_1}{2} \left[(\boldsymbol{\sigma}_{aa'})^2 - \frac{3}{2} \right], \quad (14)$$

где $\mathbf{S}_{aa'} = \mathbf{S}_a + \mathbf{S}_{a'}$, $\boldsymbol{\sigma}_{aa'} = \boldsymbol{\sigma}_{aa'}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}_{aa'}^{(2)}$, а суммирование производится по всем ребрам решетки. В этой же работе было показано, что если величина J_2/J_1 лежит в диапазоне от 1/2 до некоторого значения $j_d \sim 1$, то поведение системы при низких энергиях можно описывать гамильтонианом димера. Наличие связи на ребре определяется величиной суммар-

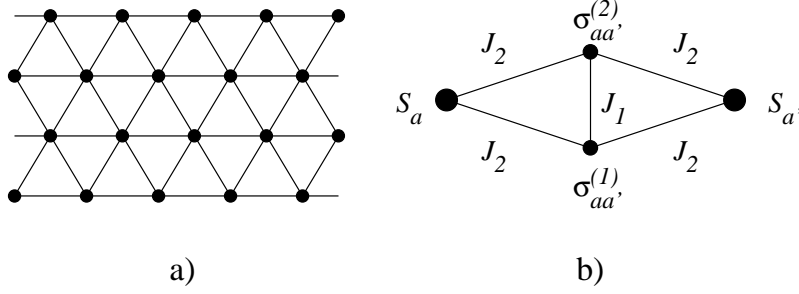


Рис. 9: Структура спиновой решетки. **a** Основа решетки - треугольная решетка на ребрах которой могут существовать связи. **b** Отдельное ребро решетки. Структура соответствующая одному ребру решетки изображенной в части **a**. S - спины находящиеся в узлах решетки, σ - спины находящиеся на ребре. J_1 - энергия взаимодействия спинов на ребре. J_2 - энергия взаимодействия спина на ребре и на узле. Узловые спины напрямую не взаимодействуют.

ного спина $\sigma_{aa'}$ на нем. Если $\sigma_{aa'} = 1$, то узлы a и a' связаны, а если $\sigma_{aa'} = 0$, то связь отсутствует.

Электронный кристалл на поверхности жидкого гелия оказывается очень подходящей структурой, для того чтобы на его основе строить такую спиновую решетку. Для этого необходимо немного изменить структуру металлической подкладки таким образом, чтобы расположение электронов на гелии соответствовало расположению спинов в решетке (см. рис. 10). Подбирая расстояния между краями соседних пластинок так, чтобы добиться необходимого соотношения между J_1 и J_2 , мы можем добиться того, что такой электронный кристалл будет в области низких энергий проявлять свойства димера.

4.2 Управляемый кубит

Зная физическое строение димера, мы можем более детально описать механизмы управления и измерения состояния кубита. Сосчитать количество связей вдоль линии Γ можно "включив" вдоль линии взаимодействие, которое даст вклад в гамильтониан вида $V = A \sum_{\langle aa' \rangle \in \Gamma} \hat{\sigma}_i^z$ (например, магнитное поле). Ясно, что такое возмущение будет давать поправку только во втором порядке. Записав матрицы $\hat{\sigma}^i = (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^i$ в базисе собственных векторов $\hat{\sigma}^z$, мы увидим, что все матричные элемен-

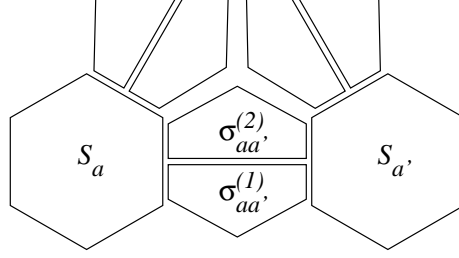


Рис. 10: Структура подкладки для электронного кристалла моделирующе-го спиновую решетку. Данная подкладка является усовершенствованием под-кладки изображенной на рис. 2 для спиновой решетки изображенной на рис. 9.

ты отвечающие переходу системы из состояния с $\sigma = 0$ равны нулю, что означает что поправка к энергии ребра без связи отсутствует. При подсчете энергии ребра со связью достаточно рассматривать лишь под-пространство состояний с $S = \sigma = 1$. При рассмотрении в пространстве собственных векторов полного спина ребра ($\hat{S} + \hat{\sigma}$) единственные ненуле-вые элементы возмущения дающие вклад в энергию основного состояния - $\langle l = 0, l_z = 0 | \hat{\sigma}^z | l = 1, l_z = 0 \rangle = \langle l = 1, l_z = 0 | \hat{\sigma}^z | l = 0, l_z = 0 \rangle = \sqrt{2/3}$. Соответственно поправка к энергии связи - $\Delta E = \frac{2}{3} \frac{A^2}{J_2}$. Как видно, энер-гия кубита линейно зависит от количества связей пересекаемых линией Г. Поэтому, зная энергию кубита, мы можем определить его состояние (0 или 1).

Разрыв связи реализовать еще легче. Как было показано в разде-ле 3.2.1, обменный интеграл двух электронов находящихся на соседних пластинах увеличивается при наложении на систему электростатическо-го поля снизу подложки. На рис. 11 приведен пример как можно реали-зовать разрыв связи. Регулируя потенциал на пластинке под подложкой, мы изменяем обменный интеграл J_1 . Как видно из формулы ??, если J_1 становится больше $2J_2$, то связи не выгодно образовываться. Поэтому, увеличение J_1 (или, как вариант, уменьшение J_2 - необходимо лишь по другому расположить нижнюю пластинку) приведет к разрыву связи.

Как вариант, можно, например не увеличивать J_1 , а уменьшать J_2 - необходимо лишь по-другому расположить нижнюю пластинку.

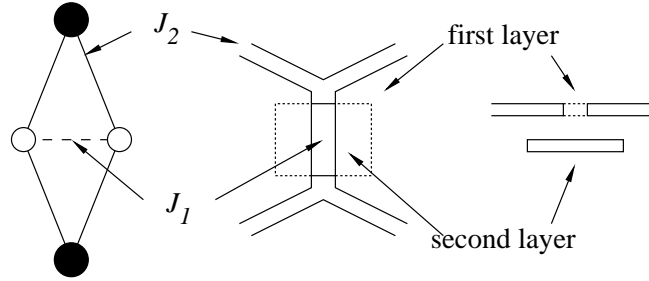


Рис. 11: Схема двойной подложки, позволяющая изменять обменный интеграл J_1 за счет вариации ослабляющего поля, и разрывать связь на данном ребре.

5 Заключение

Как мы видим, с помощью методов, описанных выше, мы вполне можем добиться энергии спин-спинового взаимодействия вплоть до $1K$. Если опустить температуру такой системы ниже $1K$, то такая электронная решетка станет двумерным антиферромагнитным кристаллом. Отметим также, что изложенные выше соображения позволяют создавать не только треугольные решетки, но в принципе, и решетки любой другой формы. Это свойство чрезвычайно полезно с точки зрения конструирования димерных гамильтонианов. Существуют модели димеров, основанные на спиновых решетках, однако такие решетки должны иметь достаточно причудливую структуру и несколько типов связей между спинами с разными энергиями взаимодействия. У спиновых решеток, построенных на основе электронных кристаллов кроме параметров, общих для всей решетки, имеется возможность менять некоторые параметры для отдельно взятой пары электронов, что в терминах спинового взаимодействия означает, что мы можем задавать произвольную энергию взаимодействия отдельно взятой пары спинов. Возможность варьирования взаимодействия между различными парами спинов позволяет надеяться на то, что удастся добиться соотношения между различными обменами, необходимого для того, чтобы данная спиновая модель имела димеризованное спиновое состояние. В дальнейшем, поскольку достаточно ясны способы управления обменным взаимодействием в электронном кристалле, на основе этой спиновой решетки можно будет построить управляемый квантовый бит.

А Оценки параметров локализации в направлении поля

Для вычисления z и E используем следующее приближение: барьер V_0 возьмем бесконечно высоким, а кулоновский потенциал разложим по x :

$$V(x) = \begin{cases} \frac{e^2}{2z_0^2}x, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases} \quad (15)$$

В результате энергия такого состояния будет равна

$$E = k \frac{e^2}{2z_0} \left(\frac{\hbar^2}{me^2 z_0} \right)^{1/3}, \quad (16)$$

а среднее значение координаты электрона

$$z = z_0 \left(1 + A \left(\frac{\hbar^2}{me^2 z_0} \right)^{1/3} \right),$$

где $k \approx 2.34$ - первый ноль функции Эйри $\Phi(x)$, а

$$A = \int_{-k}^{\infty} x \Phi^2(x) dx / \int_{-k}^{\infty} \Phi^2(x) dx \approx 1.56. \quad (17)$$

В Вычисление статсуммы

Электроны над гелием находятся в потенциале

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{e^2}{2(z_0 + x)} + eEx, & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases} \quad (18)$$

где x - направление, перпендикулярное к поверхности гелия. Поскольку сосчитать статсумму для системы с таким сложным потенциалом невозможно, мы используем следующую аппроксимацию:

$$\begin{aligned} V(x) &= -\frac{e^2}{2z_0} + \frac{e^2}{2z_0^2}x, & 0 < x < z_0, \\ V(x) &= -\frac{e^2}{2x}, & z_0 < x < \sqrt{e/E}, \\ V(x) &= eEx, & \sqrt{e/E} < x. \end{aligned} \quad (19)$$

Введем обозначения характерных энергий, которые позволят избежать громоздкости уравнений (в расчетах мы будем опускать численные коэффициенты):

$$\varepsilon_0 = \frac{e^2}{z_0}, \quad \varepsilon_k = \frac{me^4}{\hbar^2}, \quad \varepsilon_e = \varepsilon_0 \sqrt[3]{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_k}}, \quad \varepsilon_E = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 e^2 E^2}{m}}.$$

Тогда шкалу энергий можно разбить на три зоны, в каждой из которых будет доминировать один из потенциалов, использованных при аппроксимации в формуле 19. Для каждой зоны имеется своя плотность состояний:

$$\begin{aligned} \nu_1(\varepsilon) &= \frac{1}{\varepsilon_e} \sqrt{1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_e}} & -\tilde{\varepsilon}_0 > \varepsilon > -\varepsilon^{(0)} \\ \nu_2(\varepsilon) &= \sqrt{-\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon^3}} & \sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3} > \varepsilon > -\tilde{\varepsilon}_0 \\ \nu_3(\varepsilon) &= \frac{1}{\varepsilon_E} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_E}} & \infty > \varepsilon > \sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3} \end{aligned}$$

где $\tilde{\varepsilon}_0$ энергия порядка ε_0 , но $\varepsilon_0 - \tilde{\varepsilon}_0$ тоже порядка ε_0 . Разобьем статсумму на части и сделаем замену $\varepsilon \rightarrow \varepsilon T$.

$$Z = e^{-\varepsilon^{(0)}} + \int_{\varepsilon_0}^{\tilde{\varepsilon}_0} e^{-\varepsilon} \nu_1(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\tilde{\varepsilon}_0}^{\sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3}} e^{-\varepsilon} \nu_2(\varepsilon) d\varepsilon + \int_{\sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3}}^{\infty} e^{-\varepsilon} \nu_3(\varepsilon) d\varepsilon \quad (20)$$

Учитывая, что температура системы будет около $1K$, получим, что в нашей задаче имеет место случай $\varepsilon_k \gg \varepsilon_0 \gg \varepsilon_e \gg 1$. Также подразумевается, что $\varepsilon_E \ll \varepsilon_e$. К сожалению, численные коэффициенты в показателях экспонент сосчитать не удалось. Запишем выражение

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon^{(0)}} Z &= 1 + e^{\varepsilon_e} \varepsilon_e^{-3/2} \int_{\varepsilon_e}^{\infty} e^{-\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon + \left(\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_E}\right)^{3/8} e^{-\varepsilon_0} + \\ &+ e^{-\varepsilon_0} \sqrt{\varepsilon_k} \int_0^{\tilde{\varepsilon}_0} (e^{-\varepsilon} - 1) \varepsilon^{-3/2} d\varepsilon + e^{-\varepsilon_0} \varepsilon_E^{-3/2} \int_{(\varepsilon_k \varepsilon_E^3)^{1/4}}^{\infty} e^{-\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \approx \\ &\approx 1 + \frac{1}{\varepsilon_e} e^{-\varepsilon_e} + \sqrt{\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0^3}} e^{-\varepsilon_0} + \left(\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_E}\right)^{3/8} e^{-\varepsilon_0} + e^{-\varepsilon_0} \varepsilon_E^{-3/2} \int_{\tilde{\varepsilon}_0}^{\infty} e^{-\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Оценив интегралы, получим:

$$e^{\varepsilon^{(0)}} Z = 1 + \frac{1}{\varepsilon_e} e^{-\varepsilon_e} + \sqrt{\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0^3}} e^{-\varepsilon_0} + \left(\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_E}\right)^{3/8} e^{-\varepsilon_0} \left(1 + \frac{1}{(\varepsilon_k \varepsilon_E^3)^{3/8}} \int_{\sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3}}^{\infty} e^{-\varepsilon} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon\right). \quad (21)$$

Последнее слагаемое с интегралом можно оценить в двух случаях - когда $E \ll T^2/e^3$, тогда слагаемое равно $1/(\varepsilon_k \varepsilon_E^3)^{3/8} \gg 1$, и при $E \gg T^2/e^3$ - слагаемое равно $\frac{1}{\sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3}} e^{-\sqrt[4]{\varepsilon_k \varepsilon_E^3}} \ll 1$. Итого, величина $e^{\varepsilon^{(0)}} Z$ (равная $1/\mathcal{P}$, где \mathcal{P} - вероятность найти электрон в основном состоянии) становится близкой к единице, когда электрическое поле по порядку величины равно $E \sim \frac{T^2}{e^3} e^{-e^2/z_0 T}$.

С Энергия двух электронов на одной пластинке

Нас интересует разность энергий между двумя состояниями, когда два электрона находятся на одной и разных пластинках. Расчет можно произвести в двух противоположных случаях - сильного и слабого взаимодействий - когда электростатическое отталкивание либо доминирует либо, наоборот, может рассматриваться как возмущение. Влиянием соседних электронов, создающих слабый потенциал $\Delta U = 12\pi \frac{e^2 z^2}{D^5} r^2$, мы пренебрежем.

С.1 Слабое взаимодействие

Найдем потенциальную энергию взаимодействия двух электронов на одной пластинке при условии $e^2 z/D^2 \ll \hbar^2/mD^2$. Поскольку шестиугольник по форме очень близок к кругу, поэтому расчеты мы будем проводить, считая пластинку круглой. Нормированная волновая функция основного состояния электрона равна

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi l} J_1(\mu)} J_0\left(\mu \frac{z}{l}\right), \quad (22)$$

где μ - первый ноль функции Бесселя $J_0(x)$. В первом приближении энергия состояния $|\uparrow\downarrow, --\rangle$ равна

$$U_0 = \frac{2e^2}{\pi^2 l^4 J_1^4(\mu)} \int J_0^2\left(\mu \frac{r_1}{l}\right) J_0^2\left(\mu \frac{r_2}{l}\right) \times \\ \times \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + 4z^2}} \right) d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2$$

где интегрирование проходит в круге радиуса $l = D/2$, или

$$U_0 = C(4z/D) \frac{e^2}{D}, \quad (23)$$

$$C(\beta) = \frac{4}{\pi^2 J_1^4(\mu)} \int J_0^2(\mu r_1) J_0^2(\mu r_2) \times \\ \times \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + \beta^2}} \right) d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2, \quad (24)$$

где интегрирование проходит в круге радиуса 1. Рассмотрим выражение для $C(\beta)$. Для начала разобьем интеграл на две части - $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < \delta$ и $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > \delta$, причем δ выберем такой чтобы $1 \gg \delta \gg \beta$. Первую часть интеграла (при $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < \delta$) можно переписать так:

$$\int_{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < \delta, r_1 < 1, r_2 < 1} F(r_1, r_2) \times \\ \times \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + \beta^2}} \right) d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \approx \\ \approx \int_{r_2 < 1} F(r_2, r_2) \int_{r < \delta} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + \beta^2}} \right) d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{r}_2 = \\ = 2\pi \int_{r_2 < 1} F(r_2, r_2) \left(\delta + \alpha - \sqrt{\delta^2 + \beta^2} \right) d^2\mathbf{r}_2 \approx \\ \approx 4\pi^2 \beta \int_0^1 F(R, R) R dR. \quad (25)$$

Оценим вторую часть интеграла. При $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > \delta$ подынтегральное выражение можно разложить по β , и учитывая что в основном, свое

значение интеграл будет набирать на $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \sim \delta$, получим

$$\begin{aligned} & \int_{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > \delta, r_1 < 1, r_2 < 1} F(r_1, r_2) \times \\ & \times \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 + \beta^2}} \right) d^2 \mathbf{r}_1 d^2 \mathbf{r}_2 \approx \\ & \approx \int_{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| > \delta, r_1 < 1, r_2 < 1} F(r_1, r_2) \frac{\beta^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3} d^2 \mathbf{r}_1 d^2 \mathbf{r}_2 \sim \frac{\beta^2}{\delta^2}. \end{aligned}$$

Как видно, при малых β вторая часть интеграла много меньше первой, и значение интеграла можно вычислять по формуле 25

Как результат, с точностью до линейных членов по β , $C(\beta)$ имеет вид

$$C(\beta) = \frac{16\beta}{J_1^4(\mu)} \int_0^1 J_0^4(\mu r) r dr, \quad (26)$$

а потенциальная энергия

$$U_0 = B \frac{e^2 z}{D^2}, \quad (27)$$

где

$$B = \frac{64}{J_1^4(\mu)} \int_0^1 J_0^4(\mu r) r dr \approx 67. \quad (28)$$

Состояние $|\uparrow\uparrow, --\rangle$ отличается от $|\uparrow\downarrow, --\rangle$ тем, что один из электронов находится в первом возбужденном состоянии. Соответственно энергия такого состояния равна

$$U_1 = \tilde{B} \frac{e^2 z}{D^2} + 2(\mu_2^2 - \mu^2) \frac{\hbar^2}{mD^2}, \quad (29)$$

где μ_2 - второй ноль функции Бесселя, а \tilde{B} равно

$$\tilde{B} = \frac{64}{J_1^2(\mu) J_1^2(\mu_2)} \int_0^1 J_0^2(\mu r) J_0^2(\mu_2 r) r dr \approx 57. \quad (30)$$

С.2 Сильное взаимодействие

Рассмотрим ту же систему при условии $e^2 z^2 / D^3 \gg \hbar^2 / mD^2$. В этом случае электроны будут располагаться, как показано на рис. 12. Тогда по-

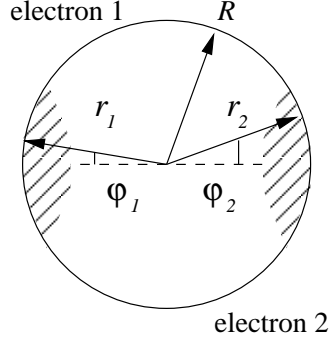


Рис. 12: Два электрона на одной пластинке в случае сильного отталкивания. Электроны стремятся локализоваться на противоположных краях пластинки, и их движение сволится теперь к малым колебаниям вокруг точек равновесия и вращению системы в целом.

тенциал можно разложить:

$$8e^2z^2 \left((D - 2r_1)^2 + (D - 2r_2)^2 + 2(D - 2r_1)(D - 2r_2) \times \right. \\ \left. \times \cos(\phi_2 - \phi_1) \right)^{-3/2} \approx \frac{e^2z^2}{D^3} \left(1 - 3\frac{r_1 + r_2}{D} - \frac{3}{8}(\phi_2 - \phi_1)^2 \right).$$

Динамический член принимает следующий вид

$$\frac{\hbar^2}{mD^2}(\Delta_1 + \Delta_2) = \frac{\hbar^2}{mD^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{mD^2} + 4\frac{\hbar^2}{mD^2} \frac{\partial^2}{\partial (\phi_2 - \phi_1)^2},$$

где l - значение орбитального момента. Решая соответствующие уравнения, получаем, что энергия системы повышается на величину

$$\Delta U = \frac{e^2z^2}{D^3} \left(1 + \frac{3\xi}{6^{1/3}}\gamma^{1/3} + \sqrt{\frac{3}{2}}\gamma^{1/2} + (l^2 - 4\mu^2)\gamma \right),$$

где $\gamma = \hbar^2 D / m e^2 z^2 \ll 1$, $\mu = 2.40$ - первый ноль функции Бесселя, а $\xi = 2.34$ - первый ноль функции Эйри. Величины U_0 и U_1 различаются соответственно значениями орбитального момента ($l = 0$ для U_0 , и $l = 1$ для U_1):

$$U_0 = \frac{e^2z^2}{D^3} \left(1 + \frac{3\xi}{6^{1/3}}\gamma^{1/3} + \sqrt{\frac{3}{2}}\gamma^{1/2} - 4\mu^2\gamma \right), \quad (31)$$

$$U_1 = U_0 + \frac{\hbar^2}{mD^2}. \quad (32)$$

Д Гамильтониан системы электронов на решетке

Движение электронов на эффективной решетке, к которой сводится система пластинок под гелием описывается гамильтонианом, несколько более сложным, чем гамильтониан Хаббарда. Главное отличие состоит в том что, на одном узле могут находиться два электрона с одинаковыми спинами, в разных орбитальных состояниях. Для простоты рассмотрим модель, когда на каждом узле существуют два уровня с разной энергией. Основное состояние системы - когда на каждом узле находится по одному электрону на низшем энергетическом уровне.

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{ij,\lambda\chi} I_{ij,\lambda\chi} \left(c_{i,\lambda\uparrow}^{\dagger} c_{j,\chi\uparrow} + c_{i,\lambda\downarrow}^{\dagger} c_{j,\chi\downarrow} \right) + \\ & + \sum_i \left(U_0 n_{i,0\uparrow} n_{i,0\downarrow} + \right. \\ & \left. + U_1 (n_{i,0\uparrow} n_{i,1\uparrow} + n_{i,0\downarrow} n_{i,1\downarrow} + n_{i,0\uparrow} n_{i,1\downarrow} + n_{i,0\downarrow} n_{i,1\uparrow}) \right), \end{aligned} \quad (33)$$

где i, j - нумеруют узлы решетки, λ, χ - принимают значения 0 и 1 - основной и возбужденный уровни, соответственно, а \uparrow, \downarrow обозначают спиновое состояние электрона.

Рассмотрим взаимодействие электронов, находящихся на двух соседних узлах. Состояние электронов на двух узлах будем обозначать как $|A, B\rangle$, где A и B могут принимать значения $--$ - электронов на узле нет, $-\uparrow$ и $-\downarrow$ - один электрон в низшем состоянии, $\uparrow\downarrow, \uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ - на узле два электрона. Согласно теории возмущений, поправка к энергии состояния $|-\uparrow, -\downarrow\rangle$ происходит во втором порядке при переходах через состояния $|--, \uparrow\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\downarrow, --\rangle$, а к энергии состояния $|-\uparrow, -\uparrow\rangle$ - при переходах через состояния $|--, \uparrow\uparrow\rangle$ и $|\uparrow\uparrow, --\rangle$. В результате, энергия состояния $|-\uparrow, -\downarrow\rangle$ уменьшится на $2I_{ij}^2/U_{\uparrow\downarrow}$, а энергия состояния $|-\uparrow, -\uparrow\rangle$ - на $2I_{ij}^2/U_{\uparrow\uparrow}$. В конце концов, гамильтониан взаимодействия электронов спроецированный на пространство состояний спиновой решетки можно записать как

$$\hat{H} = \sum_{ij} \frac{1}{2} I_{ij}^2 \left(\frac{1}{U_0} - \frac{1}{U_1} \right) \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j. \quad (34)$$

Е Потенциал щели

Нас интересует потенциальная энергия электрона, находящегося на постоянной высоте над металлической поверхностью со щелью. Мы найдем эту энергию как функцию его горизонтальной координаты. Задача решена в двух предельных случаях: узкой ($a \ll z$) и широкой щели ($a \gg z$). Через a и z обозначены ширина щели и высота над поверхностью соответственно. Также сосчитано подбарьерное действие, соответствующее туннелированию через барьер, создаваемый потенциалом щели.

Е.1 Узкая щель

Поскольку такая задача в учебниках не рассматривается, остановимся на ней подробнее. Для удобства разобьем ее на две части.

Е.1.1 Рассмотрение плоской задачи

Рассмотрим плоскость со щелью шириной $2b$, которая экранирует внешнее электрическое поле E_{ext} приложенное сверху. В случае отсутствия щели на всей пластине равномерно распределился бы заряд с поверхностной плотностью $\sigma_0 = \frac{E_{ext}}{4\pi}$. При наличии щели поверхностный заряд будет равен [13]

$$\sigma_{\Sigma} = \frac{E_{ext}}{4\pi} \frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}}. \quad (35)$$

Этот заряд можно представить в виде $\sigma = \sigma_0 + \sigma_1$, где σ_1 изображено на рис. 13. На самом деле распределение зарядов будет иметь вид

$$\sigma_{\pm} = \frac{E_{ext}}{8\pi} \left(\frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}} \pm 1 \right),$$

где σ_{\pm} - заряд на верхней и на нижней стороне пластины соответственно. Но поскольку на электрон действует сумма зарядов сверху и снизу ($\sigma_+ + \sigma_-$), то ответ будет такой как написано выше.

Е.1.2 Инверсия

Метод инверсии для решения электростатических задач заключается в следующей последовательности действий:

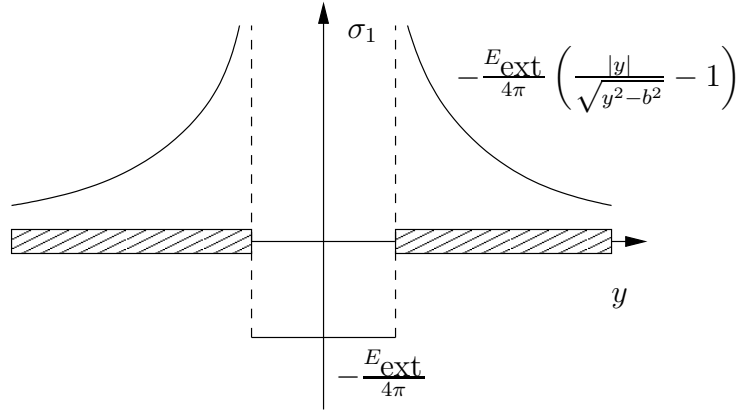


Рис. 13: Добавочный поверхностный заряд около щели, возникающий за счет краевых эффектов, вдобавок к обычному поверхностному заряду обеспечивающему экранирование и равному $E_{\text{ext}}/4\pi$.

1. Выбираем удобную для нас сферическую систему координат;
2. θ и φ оставляем те же, и делаем замену $r = \frac{a^2}{r'}$ (a выбираем сами);
3. Согласно нашему преобразованию перемещаем все наши объекты исходной задачи придерживаясь правила что если заряд переместился из точки r в точку r' , то его величина изменится и станет равной $e' = \frac{a}{r_e} e$;
4. Решаем новую электростатическую задачу, получаем зависимость потенциала от координат - $\varphi'(r')$;
5. Получаем потенциал в исходной задаче по формуле $\varphi(r) = \frac{a}{r} \varphi'(\frac{a^2}{r})$.

Произведя данные операции, как показано на рисунке 14, мы получим следующую задачу: заряд в центре проводящего шара со щелью переменной ширины (см. рис 15). Щель имеет вид кольца с радиусом

$$R = \frac{1}{2} \frac{z^2}{\sqrt{x^2 + z^2}},$$

и шириной

$$D(\phi) = \frac{az^2}{x^2 + z^2} (1 + \cos \phi).$$

где $a = 2b$ - ширина щели в изначальной задаче (эти формулы легко получаются из элементарных геометрических построений). Найдем потенциал, создаваемый единицей длины щели в центре сферы. Выражение

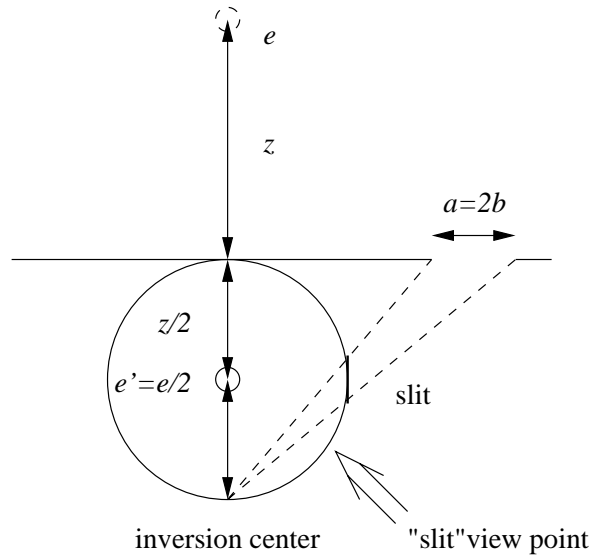


Рис. 14: Схема применения метода инверсии. При преобразовании $r = \frac{z^2}{r'}$, плоскость превращается в сферу, электрон переходит в ее центр, а щель видоизменяется.

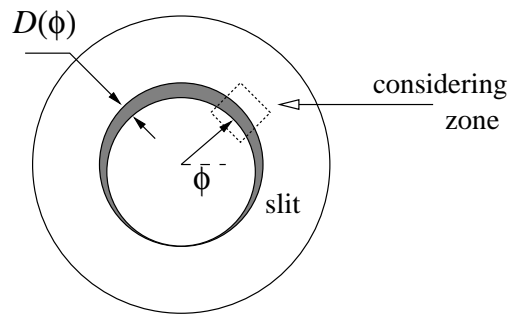


Рис. 15: Вид щели после инверсии, если смотреть как показывает большая стрелка на рис. 14. Ширина щели $D(\phi)$ получается гораздо меньшей чем радиус сферы, и всю щель можно разбить на отдельные участки, на которых края щели можно считать параллельными друг другу.

для потенциала

$$\varphi' = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma_1(y)}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy = \frac{E_{ext}}{4\pi} \left(2 \int_b^{+\infty} \frac{\frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2}} - 1}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy - \int_{-b}^b \frac{1}{\sqrt{z^2/4 + y^2}} dy \right).$$

Учитывая что

$$\int_b^c \frac{|y|}{\sqrt{y^2 - b^2} \sqrt{y^2 + z^2/4}} dy = \ln \left(\sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{c^2 + z^2/4} \right) - \ln \sqrt{b^2 + z^2/4},$$

а также что

$$\int_0^c \frac{1}{\sqrt{y^2 + z^2/4}} dy = \ln \left(c + \sqrt{c^2 + z^2/4} \right) - \ln z/2,$$

получим, что потенциал равен

$$\varphi' = \frac{E}{4\pi} \ln \left(1 + \frac{D^2(\phi)}{z^2} \right). \quad (36)$$

Найдем теперь потенциальную энергию заряда. Учитываем соотношения $\varphi = \varphi'/2$, $U = e\varphi/2$ и интегрируем по кольцу-щели:

$$\begin{aligned} U(x) &= \frac{e}{4} \int_0^{2\pi} \varphi'(\phi) R d\phi = \frac{e}{4} \frac{4e/z^2}{8\pi} \frac{z^2}{\sqrt{x^2 + z^2}} \times \\ &\times \int_0^{2\pi} \ln \left(1 + \frac{a^2 z^2}{(x^2 + y^2)^2} (1 + \cos \phi)^2 \right) d\phi \approx \\ &\approx \frac{e}{4} \frac{4e/z^2}{8\pi} \frac{z^2}{\sqrt{x^2 + z^2}} \int_0^{2\pi} \frac{a^2 z^2}{(x^2 + y^2)^2} (1 + \cos \phi)^2 d\phi = \\ &= \frac{e^2}{8\pi} \frac{a^2 z^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}} \int_0^{2\pi} (1 + \cos \phi)^2 d\phi. \end{aligned}$$

Итак, конечный ответ:

$$U(x) = \frac{3}{8} \frac{e^2 z^2 a^2}{(x^2 + z^2)^{5/2}}. \quad (37)$$

Действие соответственно равно

$$\begin{aligned} S &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U(x)} dx = \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}} \sqrt{3} \int_0^\infty (1 + x^2)^{-5/4} dx = \\ &= C \sqrt{\frac{me^2 a^2}{\hbar^2 z}}, \end{aligned} \quad (38)$$

где $C \approx 2.07$.

Е.2 Широкая щель

В случае $z \ll a$ мы тогда можем использовать решение задачи о взаимодействии заряда с полуплоскостью [13]. Энергия системы в наших обозначениях

$$U(x) = \frac{e^2}{4\pi z} \left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}} + \frac{\pi}{2} - \arctan \frac{x}{z} \right). \quad (39)$$

Действие мы тогда можем оценить примерно так:

$$S = 2 \int_{-\infty}^{z\Lambda} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U(x)} dx,$$

где Λ - обрезка равная примерно $a/2z$. Тогда действие равно

$$S = \sqrt{\frac{2me^2 z}{\hbar^2}} \left(\Lambda - \frac{1}{\pi} \log \Lambda + C \right), \quad (40)$$

где $C \approx 0.29$.

Содержание

1	Введение.	1
2	Устройство системы и условия применимости гамильтониана Хаббарда	3
2.1	Локализация электрона в направлении, перпендикулярном поверхности гелия	5
2.2	Устойчивость поверхности гелия	5
2.3	Режимы работы системы	6
2.4	Стабильность системы и модель Хаббарда	8
3	Вычисление обменных интегралов и энергии спинового взаимодействия интегралов	9
3.1	Обменный интеграл в простейшем случае	10
3.2	Уменьшение действия	12
3.2.1	Ослабляющее поле	12
3.2.2	Дополнительное экранирование	14
4	Модель квантового димера и ее применения	15
4.1	Электронный кристалл и модель квантового димера	17
4.2	Управляемый кубит	18
5	Заключение	20
A	Оценки параметров локализации в направлении поля	21
B	Вычисление статсуммы	21
C	Энергия двух электронов на одной пластинке	23
C.1	Слабое взаимодействие	23
C.2	Сильное взаимодействие	25
D	Гамильтониан системы электронов на решетке	27
E	Потенциал щели	28
E.1	Узкая щель	28
E.1.1	Рассмотрение плоской задачи	28
E.1.2	Инверсия	28

Список литературы

- [1] M. Roger, et al., Phys. Rev. B **30**, 6432 (1984)
- [2] R. P. Feynmann and A. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965)
- [3] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism* (McGraw-Hill, 1970)
- [4] B. Bernu, L.Candido, D. M. Ceperley, cond-mat/0008062
- [5] E. Cheng, M. W. Cole, Phys. Rev. B **50**, 1136 (1994)
- [6] F. M. Peeters, Phys. Rev. B **30**, 159 (1984)
- [7] H. Ikezi, P. M. Platzman, Phys. Rev. B **23**, 1145 (1981)
- [8] Volodin A.P. Haikin M.S. Edelman V.C., JETP Letters **26** 707 (1977)
- [9] K. Mima, H. Ikezi, Phys. Rev. B **17**, 3567 (1978)
- [10] L. M. Sander, Phys. Rev. B **11**, 4350 (1975)
- [11] Chernikova D.M., JETP **68** 249 (1975)
- [12] Crandall R.S. Williams R., Phys. Rev. A **5** 2183 (1972)
- [13] L. D. Landau, E. M. Lifshits, *Electrodynamics of Continuous Media* (Moscow, 1982)
- [14] L.B.Ioffe et al, *Nature*, **415**, 503 (2002)
- [15] Ioselevich A.S. *To Quantum Dimers Model from a spin lattice with Heisenberg exchange*