

Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

Alina Mreńca-Kolasińska

23 listopada 2021, ostatnia aktualizacja 6 kwietnia 2024

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Kropka kwantowa - układy dwustanowe

Qubit – jednostka informacji kwantowej. Kwantowomechanicznym układ w dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta. Różni się od klasycznego bitu tym, że może znajdować się w dowolnej superpozycji dwóch stanów kwantowych.

Przykłady 2-stanowych układów w kropkach kwantowych

- Stany $|0\rangle$ $|1\rangle$
- Spin w kropce kwantowej $|\uparrow\rangle$ $|\downarrow\rangle$
- Ładunek w podwójnej kropce kwantowej $|L\rangle$ $|R\rangle$
- Para elektron-dziura w kropce $|0\rangle$ $|X\rangle$

Stan qubitu (notacja Diraca): $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Reprezentacja na sferze Blocha

- Stan qubit: $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

- Możliwa parametryzacja przez θ , δ : $\alpha = \cos(\theta/2)$, $\beta = e^{i\delta} \sin(\theta/2)$

$$|\psi\rangle = (\cos(\theta/2), e^{i\delta} \sin(\theta/2))^T$$

- Kolejny sposób zapisu: wektor polaryzacji

$$\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$$

- $P_i = \langle \sigma_i \rangle$

- σ_i – macierze Pauliego

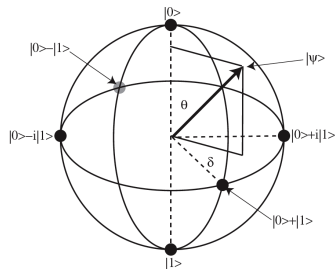
$$P_x = \sin(\theta) \cos(\delta)$$

$$P_y = \sin(\theta) \sin(\delta)$$

$$P_z = \cos(\theta)$$

- $|\mathbf{P}| = 1$, można przedstawić w 3D

- Początek wektora w środku układu współrzędnych, koniec na sferze (tzw. sferze Blocha)



Sfera Blocha

- macierz gęstości

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

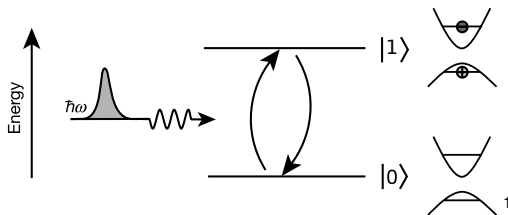
- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Oscylacje Rabiego

- Stan qubitu można „obracać” poprzez sprzężenie qubitu z polem np. elektrycznym
- Załóżmy, że układ dwustanowy $|0\rangle$, $|1\rangle$ wzbudzamy przez zewnętrzne oscylujące pole
- Na przykład: laser wzbudzający parę elektron-dziura (ekscyton) w kropce kwantowej
- $|0\rangle$ – brak ekscytonu, $|1\rangle$ – jeden ekscyton w kropce
- Możliwe są stany wzbudzone ekscytonu, ale jeśli ich energie są znacznie wyższe, pomijamy je.



¹A. Zrenner et al, Nature 418, 612 (2002)

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Ewolucja w czasie opisana jest przez hamiltonian

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + V(t), \quad V(t) = -eEx \sin(\omega t) = -eEx \frac{1}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Tu $V(t)$ opisuje oscylujące pole elektryczne w kierunku x .
- Część niezaburzona równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle \quad (1)$$

- Ma rozwiązania

$$|\psi_n(t)\rangle = |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

$|n\rangle$ mogą być $|0\rangle$, $|1\rangle$ lub wyższym stanem wzbudzonym. $\omega_n = E_n/\hbar$

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Do równania opisującego układ ze wzbudzeniem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

wstawiamy rozwiązanie będące kombinacją stanów niezaburzonego układu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

- Po wstawieniu do (2)

$$i\hbar \sum_n \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \right) |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle \right] = \sum_n \left[a_n(t) \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) V(t) |\psi_n(t)\rangle \right]$$

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Do równania opisującego układ ze wzbudzeniem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

wstawiamy rozwiązanie będące kombinacją stanów niezaburzonego układu

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle e^{-i\omega_n t}$$

- Po wstawieniu do (2)

$$i\hbar \sum_n \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \right) |\psi_n(t)\rangle + a_n(t) \cancel{\frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle} \right] = \sum_n \left[a_n(t) \cancel{\hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle} + a_n(t) V(t) |\psi_n(t)\rangle \right]$$

$\psi_n(t)$ spełnia niezaburzone równanie Schrödingera (1)

- Przemnażamy przez $\langle m | e^{i\omega_m t}$ i całkujemy

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez $\langle m|e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \langle m|n\rangle = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \langle m|x|n\rangle e^{i(\omega_m - \omega_n)t} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez $\langle m|e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m|x|n\rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_{mn}t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez $\langle m|e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m|x|n\rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_{mn}t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Po przekształceniach

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m(t) = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) x_{mn} (e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - e^{i(\omega_{mn} - \omega)t})$$

Oscylacje Rabiego – wyprowadzenie

- Po przemnożeniu przez $\langle m|e^{i\omega_m t}$

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial t} a_n(t) \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{mn}} = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) \underbrace{\langle m|x|n\rangle}_{x_{mn}} \underbrace{e^{i(\omega_m - \omega_n)t}}_{\exp(i\omega_{mn}t)} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

- Po przekształceniach

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_m(t) = -\frac{eE}{2i} \sum_n a_n(t) x_{mn} (e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - e^{i(\omega_{mn} - \omega)t})$$

- Do tej pory nie zrobiliśmy żadnych przybliżeń. Wprowadzamy przybliżenia:
 - Uwzględniamy tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$
 - Pominiemy człony z wysoką częstotliwością oscylacji – szybkozmienne człony ulegają uśrednieniu dla skali czasowej pomiaru oscylacji Rabiego.
 - Jest to tzw. rotating wave approximation, RWA

Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstość wzbudzenia jest bliska rezonansowej $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

Oscylacje Rabiego – przybliżenie

- Tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstość wzbudzenia jest bliska rezonansowej $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

Oscylacje Rabi'ego – przybliżenie

- Tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstość wzbudzenia jest bliska rezonansowej $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} - e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Oscylacje Rabi'ego – przybliżenie

- Tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstość wzbudzenia jest bliska rezonansowej $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} + e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} + e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Ponieważ pomijamy człony inne niż $\omega_{10} - \omega = \epsilon$ (RWA).

Oscylacje Rabi'ego – przybliżenie

- Tylko stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{00}+\omega)t} - e^{i(\omega_{00}-\omega)t}) + a_1(t)x_{01} (\underbrace{e^{i(\omega_{01}+\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}-\omega)t)} - \underbrace{e^{i(\omega_{01}-\omega)t}}_{\exp(-i(\omega_{10}+\omega)t)})] \quad (3)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(\omega_{10}+\omega)t} - e^{i(\omega_{10}-\omega)t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{11}+\omega)t} - e^{i(\omega_{11}-\omega)t})] \quad (4)$$

Ponieważ $\omega_{nn} = \omega_n - \omega_n = 0$

- Skupmy się na (3). Zakładamy, że częstość wzbudzenia jest bliska rezonansowej $\omega = \omega_{10} + \epsilon$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{00} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} + e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t}) + a_1(t)x_{01} (e^{i\epsilon t} + e^{-i(2\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Ponieważ pomijamy człony inne niż $\omega_{10} - \omega = \epsilon$ (RWA).

- Analogicznie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\frac{eE}{2i} [a_0(t)x_{10} (e^{i(2\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i\epsilon t}) + a_1(t)x_{11} (e^{i(\omega_{10}+\epsilon)t} - e^{-i(\omega_{10}+\epsilon)t})]$$

Oscylacje Rabiego – układ równań

- Rozwiążemy układ równań:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) &= -\frac{eE}{2i} x_{01} a_1(t) e^{i\epsilon t} \\i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) &= \frac{eE}{2i} x_{01}^* a_0(t) e^{-i\epsilon t}\end{aligned}\tag{5}$$

- Definiujemy

$$a_0(t) = e^{i\epsilon t/2} b_0(t), \quad a_1(t) = e^{-i\epsilon t/2} b_1(t)$$

- Po wstawieniu do (5) otrzymujemy

$$\begin{aligned}i\hbar \left(\frac{i\epsilon}{2} b_0(t) + \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) \right) e^{i\epsilon t/2} &= -\frac{eE}{2i} x_{01} b_1(t) e^{i\epsilon t/2} \\i\hbar \left(-\frac{i\epsilon}{2} b_1(t) + \frac{\partial}{\partial t} b_1(t) \right) e^{-i\epsilon t/2} &= \frac{eE}{2i} x_{01}^* b_0(t) e^{-i\epsilon t/2}\end{aligned}$$

Oscylacje Rabiego – układ równań

$$\frac{\partial}{\partial t} b_0(t) = \frac{\epsilon}{2i} b_0(t) + \frac{eE}{2\hbar} x_{01} b_1(t) \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b_1(t) = -\frac{\epsilon}{2i} b_1(t) - \frac{eE}{2\hbar} x_{01}^* b_0(t) \quad (7)$$

- Różniczkujemy (6)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) = \frac{\epsilon}{2i} \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) + \frac{eE}{2\hbar} x_{01} \frac{\partial}{\partial t} b_1(t) \quad (8)$$

- Wstawiamy (7) do (8)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) = \underbrace{\frac{\epsilon}{2i} \frac{\partial}{\partial t} b_0(t) - \frac{eE}{2\hbar} x_{01} \frac{\epsilon}{2i} b_1(t)}_{=(\epsilon/2i)^2 b_0 \text{ z r\u00f3w. (6)}} - \left(\frac{eE}{2\hbar}\right)^2 |x_{01}|^2 b_0(t)$$

- Otrzymujemy równanie oscylatora harmonicznego

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) + \left(\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2 + \left(\frac{eE}{2\hbar}\right)^2 |x_{01}|^2 \right) b_0(t) = 0$$

Oscylacje Rabiego – rozwiązanie

- Otrzymujemy równanie oscylatora harmonicznego

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} b_0(t) + \Omega^2 b_0(t) = 0, \quad \Omega = \sqrt{\left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2 + \left(\frac{eE}{2\hbar}\right)^2} |x_{01}|^2$$

- Rozwiązanie dla warunków początkowych $b_0 = 1$, $b_1 = 0$ (stąd $\partial b_0/\partial t = \epsilon/2i$, $\partial b_1/\partial t = -eEx_{01}^*/2\hbar$)

$$b_0(t) = \cos(\Omega t) - \frac{i\epsilon}{2\Omega} \sin(\Omega t),$$

$$b_1(t) = -\frac{eEx_{01}^*}{2\hbar\Omega} \sin(\Omega t).$$

- Funkcja falowa

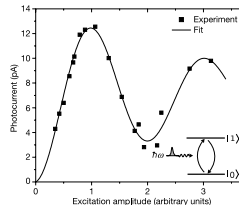
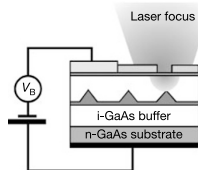
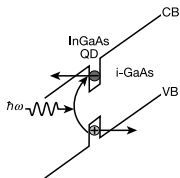
$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= a_0(t)|0\rangle e^{-i\omega_0 t} + a_1(t)|1\rangle e^{-i\omega_1 t} \\ &= b_0(t)e^{i\epsilon t/2}|0\rangle e^{-i\omega_0 t} + b_1(t)e^{-i\epsilon t/2}|1\rangle e^{-i\omega_1 t} \\ &= e^{i\epsilon t/2} \left[\cos(\Omega t) - \frac{i\epsilon}{2\Omega} \sin(\Omega t) \right] |0\rangle e^{-i\omega_0 t} \\ &\quad - e^{-i\epsilon t/2} \left[\frac{eEx_{01}^*}{2\hbar\Omega} \sin(\Omega t) \right] |1\rangle e^{-i\omega_1 t}. \end{aligned}$$

Oscylacje Rabiego – prawdopodobieństwa

- Prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie wzbudzonym

$$P_1(t) = |a_1(t)|^2 = \frac{(eE/2\hbar)^2 |x_{01}|^2}{(\epsilon/2)^2 + (eE/2\hbar)^2 |x_{01}|^2} \sin^2(\Omega t).$$

- W naszym przykładzie ze stanem $|1\rangle$ opisującym ekscyton w kropce kwantowej, impuls lasera trwający t_p jest powtarzany z częstotliwością $1/t_r$.
- Po każdym impulsie układ jest w stanie $|\psi(t_p)\rangle$ – z prawdopodobieństwem P_1 jest to ekscyton.
- W polu elektrycznym ekscyton rozpada się na elektron i dziurę, wywołując prąd.
- Prąd od pojedynczego ekscytonu jest niemierzalny. Prąd jest uśredniany po wielu impulsach.
- Uśredniony prąd jest proporcjonalny do $P_1(t_p)$.



Plan

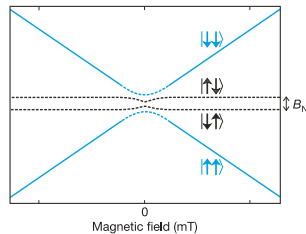
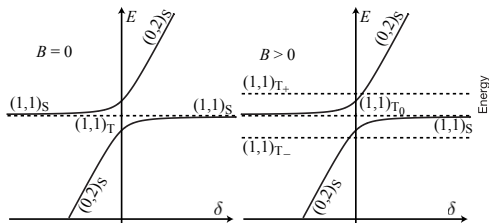
1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

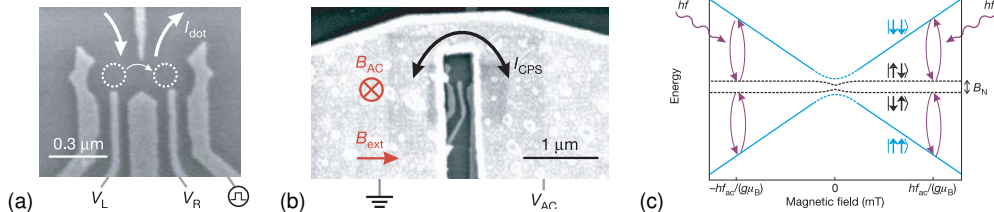
- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Pole nadsubtelne



- Spiny jądrowe półprzewodnika wytwarzają efektywne pole magnetyczne (tzw. pole Overhausera)
- Stany trypletowe mieszają się z singletowym [dlaczego?](#)
- W niezerowym polu magnetycznym stany T_+ ($|\uparrow\uparrow\rangle$) i T_- ($|\downarrow\downarrow\rangle$) różnią się energią od T_0 i S , (odpowiednio $(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$)
- T_0 i S mieszają się tworząc $|\uparrow\downarrow\rangle$ i $|\downarrow\uparrow\rangle$

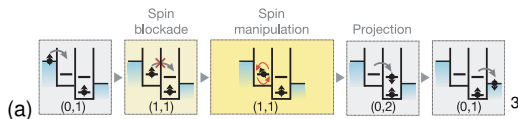
Elektronowy rezonans spinowy w podwójnej kropce kwantowej



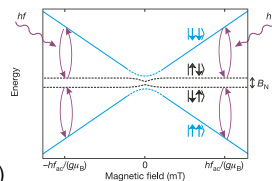
- Rozszczepienie Zeemana poziomów energetycznych elektronów przez pole magnetyczne B_{ext} w kierunku \hat{z} .
- Zmienne pole magnetyczne $\mathbf{B}_{AC} = B_{AC}(\cos(2\pi f_{AC}t), \sin(2\pi f_{AC}t), 0)$ prostopadłe do B_{ext} wywołuje przejścia między tymi poziomami (gdy oscylacje w rezonansie z energią przejścia $hf_{AC} = g\mu B_{\text{ext}}$) – Fig. (b, c).²
- Obserwacja oscylacji Rabiego.
- Niestety w pojedynczych kropkach kwantowych nie udało się dotąd tego zrealizować
 - Wymagane częstotliwości radiowe – wyindukowane pole elektryczne wypycha elektron z kropki
 - Zamiast tego zastosowane podwójne kropki kwantowe – Fig. (a).

²F. Koppens et al., Nature 442, 766 (2006).

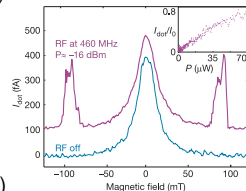
Elektronowy rezonans spinowy w podwójnej kropce kwantowej



- Pole B_{ext} rozszczepia stany trypletowe. Stan podstawowy ma niezerowy spin \Rightarrow 2 elektrony w stanie $|\uparrow\uparrow\rangle \Rightarrow$ **spin blockade**
- **Spin manipulation:** pole B_{AC} oscylujące z częstotliwością rezonansową może wywołać przejście $|\uparrow\uparrow\rangle \rightarrow (|\downarrow\uparrow\rangle \pm |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$
- Obrót spinu elektronu znosi blokadę spinową
- **Projection:** przejście do stanu (0,2) i tunelowanie elektronu do elektrody \Rightarrow przepływ prądu i widoczne piki I_{dot} (gdy $B_{ext} = \pm hf_{AC}/g\mu_B$)



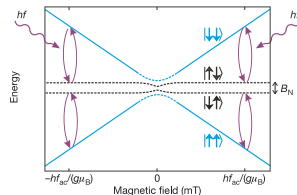
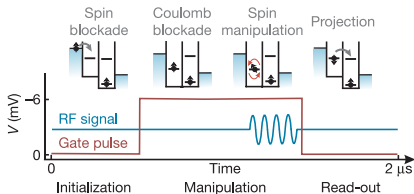
(b)



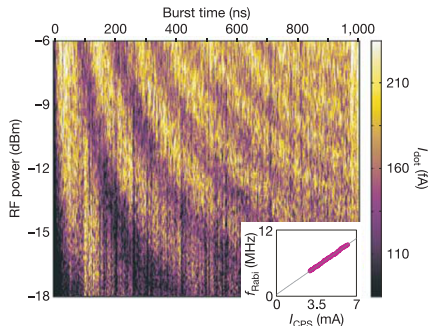
(c)

³Liczba elektronów w kropkach: (L, R), np. (0, 1) – tylko 1 elektron w prawej kropce.

Oscylacje Rabiego w podwójnej kropce kwantowej



- Częstotliwość f_{AC} obrotu B_{AC} ustalona w rezonansie z energią przejścia.
- Impuls pola B_{AC} trwający t_p prowadzi do obrotu spinu.
- Po czasie t_p mierzony jest prąd I_{dot} .
- Obrót jednego ze spinów o $(2n + 1)\pi \Rightarrow$ spiny w kropkach przeciwne $|\uparrow\downarrow\rangle$ – maksimum prądu



Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Hamiltonian

- Równanie Schrödingera zależne od czasu

$$\hat{H}(t)\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t)$$

- Hamiltonian

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_t(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

- $V(\mathbf{r})$ – potencjał uwięzienia w QD
- $V_t(\mathbf{r}, t)$ – potencjał zależny od czasu

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Schemat Eulera

- Pochodna w czasie zapisana sposób dyskretny

- oznaczamy: $t_m = m \cdot \Delta t$.

- Iloraz różnicowy w przód

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (10)$$

- Iloraz różnicowy wstecz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_m) - \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1})}{\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 1, 2, \dots,$$

- zmiana indeksu $m \rightarrow m + 1$:

$$i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}), \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

(schemat niejawny, tzn. wartość $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$ w chwili t_{m+1} pojawia się po obu stronach równania)

Schemat Cranka-Nicolson

- Ze wzorów (10) i (11) wyliczamy $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$

$$(10) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m),$$

$$(11) \Rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}),$$

- Schemat Cranka-Nicolson (C-N) to ich średnia arytmetyczna

$$\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[\hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m) + \hat{H}(t_{m+1}) \Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) \right], \quad (12)$$

- Schemat jest niejawny: $\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1})$ w chwili t_{m+1} pojawia się po obu stronach równania
 - Za chwilę poznamy sposoby rozwiązania go

Schemat Cranka-Nicolson. 1D

- Hamiltonian

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) = -\frac{\hbar}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + V_t(x, t_m) \right) \Psi(x, t)$$

- Postać dyskretną $\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m)$ znamy

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) \approx -\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) \quad (13)$$

- Z rów. (12) dla 1D

$$\begin{aligned} \Psi(x_i, t_{m+1}) = & \Psi(x_i, t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} \right. \\ & \left. - \frac{\hbar}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_{m+1}) + \Psi(x_{i-1}, t_{m+1}) - 2\Psi(x_i, t_{m+1})}{\Delta x^2} \right. \\ & \left. + V(x_i) (\Psi(x_i, t_m) + \Psi(x_i, t_{m+1})) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_{m+1})\Psi(x_i, t_{m+1}) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

Schemat Cranka-Nicolson. 1D

• Oznaczmy $\alpha \equiv -\frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2}$

• Rów. (13) możemy zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) = \begin{pmatrix} -2\alpha + V_0 & \alpha & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & -2\alpha + V_1 & \alpha & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha & -2\alpha + V_2 & \alpha & \dots & 0 \\ & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha & -2\alpha + V_{n-1} & \alpha \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha & -2\alpha + V_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi(x_0, t_m) \\ \Psi(x_1, t_m) \\ \Psi(x_2, t_m) \\ \vdots \\ \Psi(x_{n-1}, t_m) \\ \Psi(x_n, t_m) \end{pmatrix}$$

• $\Psi(x_j, t_m)$ jest elementem wektora $\Psi(t_m)$

Schemat Cranka-Nicolson. 1D

- Zapiszmy schemat C-N w postaci macierzowej

$$\Psi(t_{m+1}) = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} [\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})].$$

- Sposoby rozwiązania:
 - 1 Poprzez sprowadzenie do układu równań
 - 2 Rozwiązanie iteracyjne

Sposób 1

- Przenosimy wyrazy z t_{m+1} na lewą stronę

$$\left[\mathbf{1} - \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_{m+1}) \right] \Psi(t_{m+1}) = \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_m) \right] \Psi(t_m),$$

- Oznaczając

$$\mathbf{y} \equiv \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_m) \right] \Psi(t_m),$$

$$\mathbf{A} \equiv \left[\mathbf{1} + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \mathbf{H}(t_{m+1}) \right],$$

$$\mathbf{x} \equiv \Psi(t_{m+1}),$$

- Rozwiązanie układu równań $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ (np. biblioteki numeryczne)

Sposób 2

- Początkowo przyjmujemy $\Psi(t_{m+1})^{(0)} = \Psi(t_m)$
 - Jest to pierwsze przybliżenie $\Psi(t_{m+1})$

- Następne, lepsze przybliżenie

$$\Psi(t_{m+1})^{(1)} = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})^{(0)} \right],$$

- Dokonujemy kolejnych iteracji

$$\Psi(t_{m+1})^{(k+1)} = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i\hbar} \left[\mathbf{H}(t_m)\Psi(t_m) + \mathbf{H}(t_{m+1})\Psi(t_{m+1})^{(k)} \right],$$

- Przy odpowiednio dużej liczbie k iteracji $\Psi(t_{m+1})^{(k+1)} \approx \Psi(t_{m+1})^{(k)} \approx \Psi(t_{m+1})$
 - Tzn. $\Psi(t_{m+1})^{(k)}$ przestaje się znacząco zmieniać.
 - Możemy sprawdzić, czy np. $|\sum_i \Psi(x_i, t_{m+1})^{(k+1)}| - |\sum_i \Psi(x_i, t_{m+1})^{(k)}| < \delta$, gdzie δ jest małą liczbą.

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Schemat Askara-Cakmaka

- Pochodna w czasie – centralny iloraz różnicowy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \approx i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1})}{2\Delta t} = \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (15)$$

- Schemat jest jawny:

$$\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) = \Psi(\mathbf{r}, t_{m-1}) + \frac{2\Delta t}{i\hbar} \hat{H}(t_m) \Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad (16)$$

Jednak musimy znać funkcję falową w $t = t_0$ i $t = t_1$, zwykle znamy tylko $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$.

- $\Psi(\mathbf{r}, t_1)$ można obliczyć przy pomocy innych metod, np. schematu C-N.

Schemat Askara-Cakmaka. 1D

- Przypomnienie: Hamiltonian w postaci dyskretnej

$$\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) \approx -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m)$$

- Schemat A-C w 1D:

$$\Psi(x_i, t_{m+1}) = \Psi(x_i, t_{m-1}) + \frac{2\Delta t}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi(x_{i+1}, t_m) + \Psi(x_{i-1}, t_m) - 2\Psi(x_i, t_m)}{\Delta x^2} + V(x_i)\Psi(x_i, t_m) + V_t(x_i, t_m)\Psi(x_i, t_m) \right] \quad (17)$$

Stabilność

► Analiza von Neumanna

- **Schemat C-N jest stabilny dla każdego Δt .**

- Schemat A-C: warunek stabilności w 1D

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Schemat A-C: warunek stabilności w 3D

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

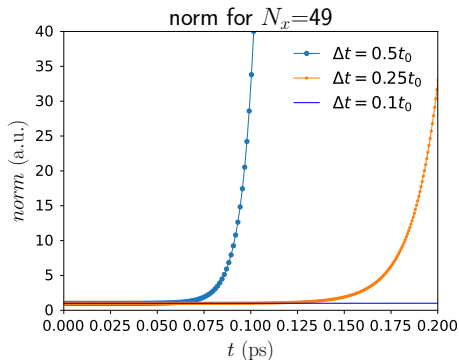
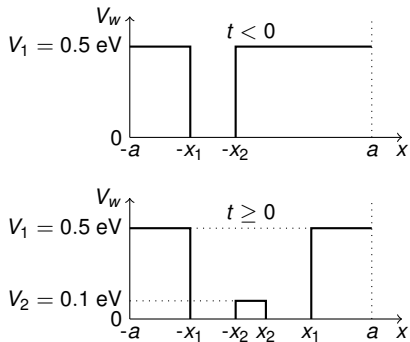
- Dla $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ otrzymujemy

$$\frac{\Delta x^2}{3\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

Metody: C-N oraz A-C – przykłady

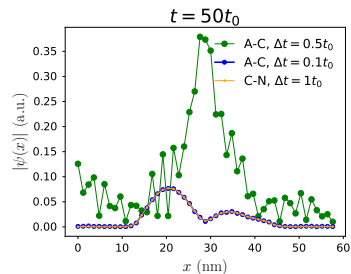
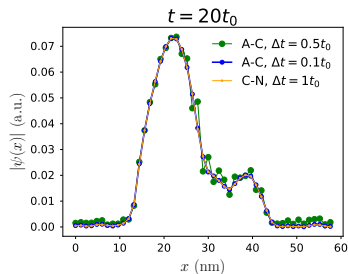
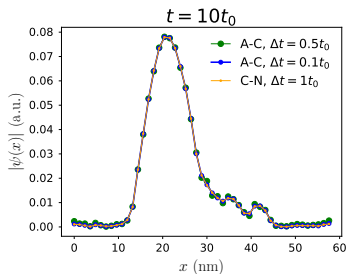
Kropka w 1D o potencjale zmiennym w chwili $t = 0$ jak poniżej.

Zależność normy funkcji falowej od czasu dla różnych Δt ($t_0 = 2.4189 \times 10^{-5}$ ps):



- Schemat A-C stabilny dla małych Δt

Metody: C-N oraz A-C – moduł funkcji falowej



- Schemat A-C stabilny tylko dla odpowiednio małych Δt .
- Schemat C-N stabilny dla większych Δt .
- Jednak dokładność wyniku zależy od Δt , duże nie zawsze lepsze.
- w C-N często obliczenia bardziej czasochłonne niż A-C. (C-N: schemat niejawny)

Inne metody dla problemów zależnych od czasu ⁴

- Metoda Floqueta – dla Hamiltonianu periodycznego w czasie
- Metoda wariacyjna zależna od czasu
- Wykorzystanie operatora ewolucji w czasie
- Metoda operatora podzielonego (ang. split operator method)

⁴Szczegóły np. K. Varga, J. A Driscoll, Computational nanoscience: Applications for molecules, nanoclusters and solids. Cambridge University Press, 2011

Plan

1 Kropki kwantowe w potencjałach zależnych od czasu

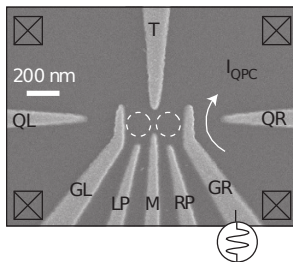
- Manipulacja nośników ładunku
- Oscylacje Rabiego
- Oscylacje Rabiego – inne przykłady

2 Metody obliczeniowe

- Schemat Cranka-Nicolson
- Schemat Askara-Cakmaka
- Laboratorium

Laboratorium: Symulacja eksperymentu

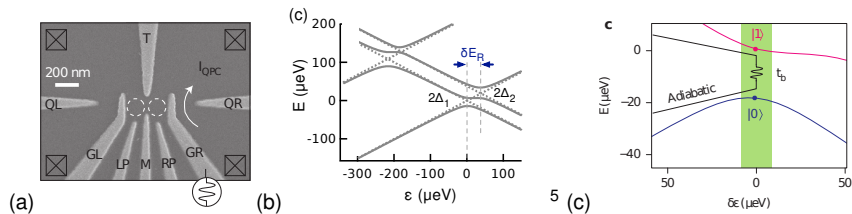
Nat. Nano 10, 243 (2015)



- Operacje na qubitach w podwójnych QD Si/SiGe
- Tu: 3 elektrony, tworzące konfiguracje ładunkowe (2, 1), (1, 2).
- Oznaczenie: (n_L, n_R) , gdzie $n_L(n_R)$ - liczba elektronów w kropce lewej (prawej)

Laboratorium: Symulacja eksperymentu

Nat. Nano 10, 243 (2015)

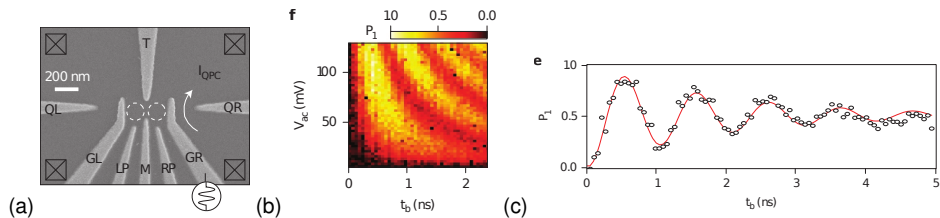


- Detuning $\delta\epsilon$ regulowane przez napięcie V_{GL}
- 2 stany podstawowe tych konfiguracji: $\delta\epsilon < 0 \Rightarrow |L\rangle = |2, 1\rangle$, $\delta\epsilon > 0 \Rightarrow |R\rangle = |1, 2\rangle$
 - W tej konfiguracji kropki posiadają więcej stanów [Rys. (b)], skupiamy się na 2 najniższych
- Anticrossing przy $\delta\epsilon = 0$ ze względu na mieszanie $|L\rangle$ i $|R\rangle$ [Rys. (c)]
- Logiczne qubity ($\delta\epsilon=0$) $|0\rangle = (|L\rangle + |R\rangle)/\sqrt{2}$, $|1\rangle = (|L\rangle - |R\rangle)/\sqrt{2}$

⁵Nat Commun 5, 3020 (2014). <https://doi.org/10.1038/ncomms4020>

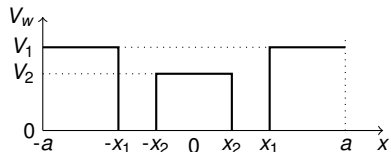
Laboratorium: Symulacja eksperymentu

Nat. Nano 10, 243 (2015)



- Wzbudzenie: impuls oscylującego napięcia na **GR** [Rys. (a)]
 - Gdy częstotliwość f_{ex} jest w rezonansie z różnicą energii stanów $|0\rangle$ i $|1\rangle$, wzbudzenie $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$
- Pomiar oscylacji Rabiego (2 stany: $|0\rangle$ i $|1\rangle$)
- Częstotliwość rezonansowa $f_{ex} = 4.54$ GHz:
 - [Rys. (b)] - zależność P_1 od czasu t_b i amplitudy wzbudzenia V_{ac}
 - [Rys. (c)] - zależność P_1 od czasu t_b przy $V_{ac} = 70$ mV

Laboratorium: uproszczenia



- Rozważamy kropki jednowymiarowe
- Hamiltonian:

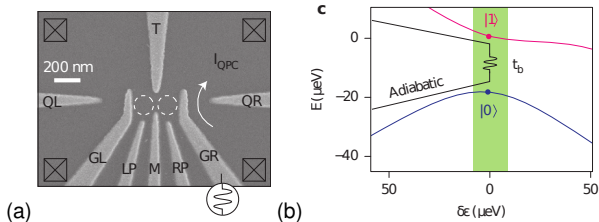
$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_w(x) + V_t(x, t),$$

- Dokładna symulacja profilu potencjału byłaby wymagająca. Zamiast tego zakładamy:
 - Potencjał uwięzienia w kropkach: $V_w(x)$ **[Rys. (a)]**
 - Symulujemy oscylujący potencjał liniowy

$$V_t(x, t) = Fx \sin(\omega t),$$

- Eksperyment: stany 3-elektronowe – dla przyspieszenia symulujemy qubit dla stanu z 1 elektronem

Szczegóły pomiaru (nie uwzględniane w symulacji)



● Inicjalizacja

- Stan $|L\rangle$ przygotowany dla $\delta\epsilon_r = -160 \mu\text{eV}$
- **[Rys. (b)]** przy zmianie (liniowo) do $\delta\epsilon = 0$ (przez 4 ns), stan $|L\rangle$ adiabaticznie⁶ przechodzi w $|0\rangle$

● Wzbudzenie: oscylujące napięcie przyłożone do GR [Rys. (a)]

- Impuls o czasie t_b
- Gdy częstotliwość jest w rezonansie z różnicą energii stanów $|0\rangle$ i $|1\rangle$, wzbudzenie $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$
- Po czasie t_b , ponownie $\delta\epsilon$ liniowo zwiększone do $\delta\epsilon = \delta\epsilon_r$
- Przy zmianie do $\delta\epsilon = \delta\epsilon_r$, zachodzi przejście adiabaticzne $|0\rangle \rightarrow |L\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |R\rangle$

● P_1 , prawdopodobieństwo elektronu w stanie $|1\rangle$ zmierzone przez pomiar zmian I_{QPC}

- Poprzez charge sensing: [szczegóły](#) oraz [wersja arxiv](#)

⁶Przy stopniowej zmianie parametrów układ dostosowuje się do konfiguracji. Będąc początkowo w stanie własnym hamiltonianu, po zmianie przechodzi w odpowiedni stan własny końcowego hamiltonianu.

- 3 Oddziaływania nadsubtelne – pole Overhausera
 - Niedawne przykłady kropek kwantowych

Oddziaływania nadsztywne

► Powrót

- Elektron w kropce oddziałuje z wieloma spinami jądrowymi atomów np. Ga i As (spin jądrowy 3/2)
- Hamiltonian opisujący oddziaływanie nadsztywne (ang. *hyperfine*):

$$\hat{H}_{HF} = \sum_i A_i \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{S}$$

- \mathbf{I}_i – operator spinu jądrowego dla atomu i
- \mathbf{S} – operator spinu elektronu
- Wytwarza to efektywne pole magnetyczne, które można przybliżyć przez klasyczne tzw. pole Overhausera, odczuwane efektywnie przez elektrony w kropce

$$\mathbf{B}_N = \frac{1}{g^* \mu_B} \left\langle \sum_i A_i \mathbf{I}_i \right\rangle$$

- g^* jest efektywną stałą Landégo
- A_i – stała sprzężenia
- Pole jest zależne od położenia i nieregularne

Oddziaływania nadsztywne

► Powrót

- Efektywny hamiltonian z polem Overhausera dla dwóch elektronów

$$\hat{H} = \frac{1}{2} g^* \mu_B (\mathbf{B}_{N1} \boldsymbol{\sigma}_1 + \mathbf{B}_{N2} \boldsymbol{\sigma}_2)$$

- Np. w bazie funkcji podwójnej kropki $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ $((1, 1)_S)$, $|\uparrow\uparrow\rangle$ $((1, 1)_{T_+})$, $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ $((1, 1)_{T_0})$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ $((1, 1)_{T_-})$,

$$\begin{pmatrix} 0 & \Delta_x - i\Delta_y & \Delta_z & -\Delta_x - i\Delta_y \\ \Delta_x + i\Delta_y & -\Sigma_z & \Sigma_x + i\Sigma_y & 0 \\ \Delta_z & \Sigma_x - i\Sigma_y & 0 & \Sigma_x + i\Sigma_y \\ -\Delta_x + i\Delta_y & 0 & \Sigma_x - i\Sigma_y & \Sigma_z \end{pmatrix}$$

- $\Delta_i = B_{i1} - B_{i2}$, $\Sigma_i = (B_{i1} + B_{i2})/\sqrt{2}$, $i = x, y, z$
- Pojawia się sprzężenie między singletem a trypletem (prowadzące do anticrossingu)
- W wysokim polu magnetycznym energia T_{\pm} jest daleka od energii singletu, ale T_0 miesza się z S prowadząc do rozszczepienia i powstania nowych stanów $|\uparrow\downarrow\rangle$ i $|\downarrow\uparrow\rangle$

Inne schematy

- Dlaczego nie wykorzystać prostszego schematu, np. Eulera? Wzór (10):

$$i\hbar \frac{\Psi(\mathbf{r}, t_{m+1}) - \Psi(\mathbf{r}, t_m)}{\Delta t} = \hat{H}(t_m)\Psi(\mathbf{r}, t_m), \quad m = 0, 1, \dots, \quad (18)$$

- Schemat jest jawny. Przykład w 1D:

$$\psi_j^{(m+1)} = \psi_j^{(m)} + i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\psi_{j+1}^{(m)} + \psi_{j-1}^{(m)} - 2\psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} \quad (19)$$

- Analiza von Neumanna schematu Eulera, $\gamma = \frac{\Delta t \hbar}{2m^* \Delta x^2}$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m)} \left[w_j^k + i\gamma (w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k) \right]$$

Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left(e^{2\pi i k / J} + e^{-2\pi i k / J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k / J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k / J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmocnienia większy od 1 dla każdego $k \neq 0$.

Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left(e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k/J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmocnienia większy od 1 dla każdego $k \neq 0$.

- Jednak po przejściu na czas urojony:

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} + \frac{\Delta\tau}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2}$$

Schemat Eulera

- C.d. analizy von Neumanna

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + i\gamma \left(e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right)$$

- Kwadrat modułu

$$|M^k|^2 = |1 + i\gamma [2 \cos(2\pi k/J) - 2]|^2 = 1 + \gamma^2 [2 \cos(2\pi k/J) - 2]^2 \geq 1$$

- Metoda niestabilna: współczynnik wzmocnienia większy od 1 dla każdego $k \neq 0$.
- Jednak po przejściu na czas urojony:

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m)} + \frac{\Delta\tau}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2}$$

- Analiza von Neumanna ($\gamma = \frac{\Delta\tau\hbar}{2m^*\Delta x^2}$)

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[w_j^k + \gamma \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

Analiza z czasem urojonym

- Współczynnik wzmocnienia

$$M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = 1 + \gamma \left(e^{2\pi i k / J} + e^{-2\pi i k / J} - 2 \right)$$

- Moduł

$$\begin{aligned} |M^k| &= |1 + \gamma [2 \cos(2\pi k / J) - 2]|^2 \leq 1 \\ -1 &\leq 1 + \gamma [2 \cos(2\pi k / J) - 2] \leq 1 \\ -2 &\leq 2\gamma \underbrace{[\cos(2\pi k / J) - 1]}_{-2 \leq \cos - 1 \leq 0} \leq 0 \end{aligned}$$

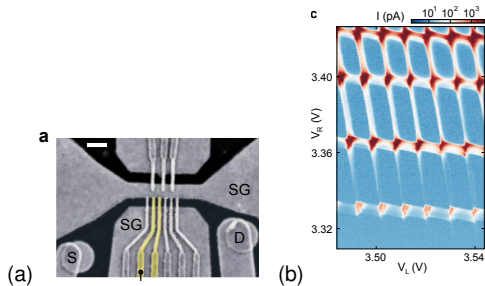
- γ nie może być większa niż 1 ($\gamma = \frac{\Delta\tau\hbar}{2m^*\Delta x^2}$)

$$\gamma \leq 1 \Rightarrow \frac{\hbar\Delta\tau}{2m^*\Delta x^2}$$

- Metoda czasu urojonego stabilna gdy $\Delta\tau \leq 2m\Delta x^2/\hbar$.

- 3 Oddziaływania nadsubtelne – pole Overhausera
 - Niedawne przykłady kropek kwantowych

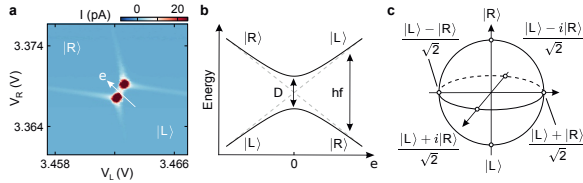
Oscylacje ładunku w podwójnych kropkach kwantowych w dwuwarstwowym grafenie⁷



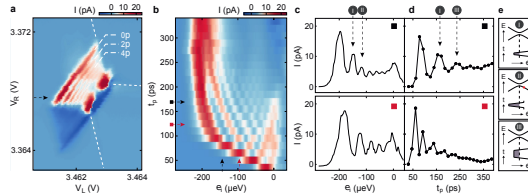
- Podwójna kropka wytworzona przez bramki
- Diagram stabilności

⁷Katrin Hecker, et al, arXiv:2303.10119, 17 Mar 2023

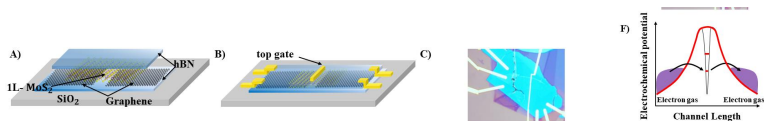
Oscylacje ładunku w podwójnych kropkach kwantowych w dwuwarstwowym grafenie



- Dwa stany – qubit



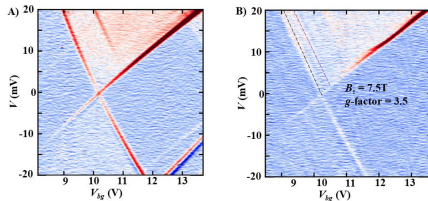
Kropki kwantowe w dichalkogenkach metali przejściowych (MoS₂)⁸



- Wąska kropka
- Spektroskopia stanów wzbudzonych
- Rozszczepienie Zeemana
- Pomiar współczynnika Landego g

⁸P. Kumar, et al, arXiv:2303.15425 , 27 Mar 2023

Kropki kwantowe w dichalkogenkach metali przejściowych (MoS_2)



- Wąska kropka
- Spektroskopia stanów wzbudzonych
- Rozszczepienie Zeemana
- Pomiar współczynnika Landego g

Stabilność, spójność, zbieżność

► Powrót

Powyższe schematy stanowią przybliżenie równania różniczkowego. Jakie wartości Δx , Δt , mają sens?

Oznaczmy $S_{\Delta t}$ jako pojedynczy krok czasowy dla schematu.

Podstawowe pojęcia dla problemów zależnych od czasu:

- Spójność – schemat w granicy zerowego kroku czasowego/przestrzennego dąży do równania różniczkowego
 - Rząd dokładności jest równy p gdy

$$\|\psi(t + \Delta t) - S_{\Delta t}\psi(t)\| = \mathcal{O}(\Delta t^{p+1}) \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad \text{dla } t \in [0, T].$$

- Spójny, gdy $p > 0$.
- Zbieżność – rozwiązanie numeryczne w granicy zerowego kroku czasowego/przestrzennego dąży do rozwiązania dokładnego

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0, n\Delta t = t} \|S_{\Delta t}^n \psi(0) - \psi(t)\| = 0.$$

- Stabilność – norma rozwiązania pozostaje skończona

$$\|S_{\Delta t}^n\| \leq C \quad \text{dla danego } C, \quad 0 < n\Delta t < T.$$

- Bezwzględna stabilność: schemat stabilny dla każdego n .

Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn. $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla $n \rightarrow \infty$, to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni \mathbf{r} i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn. $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla $n \rightarrow \infty$, to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni \mathbf{r} i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*}$$

Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn. $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla $n \rightarrow \infty$, to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsewala wiąże normę funkcji w przestrzeni \mathbf{r} i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[\sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*}$$

Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn. $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla $n \rightarrow \infty$, to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni \mathbf{r} i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[\sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} \left[\sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right]$$

Analiza von Neumanna

- Analiza dyskretnej transformaty Fouriera (TF) rozwiązania. ozn. $\Psi_j^{(m)} \equiv \Psi(\mathbf{r}_j, t_m)$

$$w_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{J}\right) \quad w_j^k = \exp\left(i\frac{2\pi jk}{J}\right)$$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m)} = \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \Psi_j^{(m)} (w_j^k)^*$$

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k$$

- Jeśli norma TF jest skończona dla $n \rightarrow \infty$, to schemat stabilny (bezwzględnie).
- Dlaczego? Ponieważ: tw. Parsevala wiąże normę funkcji w przestrzeni \mathbf{r} i jej TF.

$$\|\Psi^{(m)}\|_2^2 = J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2, \quad \text{norma: } \|\Psi^{(m)}\|_2^2 = \sum_{j=0}^{J-1} |\Psi_j^{(m)}|^2 \quad (20)$$

- Dowód:

$$J \|\tilde{\Psi}^{(m)}\|_2^2 = J \sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{j=0}^{J-1} \left[\sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right] \tilde{\Psi}_j^{(m)*} = \sum_{k=0}^{J-1} \Psi_k^{(m)} \overbrace{\left[\sum_{j=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_j^{(m)*} e^{-i\frac{2\pi jk}{J}} \right]}^{\Psi_k^{(m)*}}$$

Analiza von Neumanna schematu C-N w 1D

- Wyrażamy rozwiązanie w postaci TF

$$\psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m)} w_j^k, \quad \psi_j^{(m+1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m+1)} w_j^k, \quad w_j^k = \exp\left(i \frac{2\pi jk}{J}\right)$$

- Do schematu, rów. (14); zakładamy $V \equiv 0$, $V_t \equiv 0$

$$\psi_j^{(m+1)} = \psi_j^{(m)} - \frac{\Delta t}{2i\hbar} \frac{\hbar}{2m^*} \left[\frac{\psi_{j+1}^{(m)} + \psi_{j-1}^{(m)} - 2\psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{j+1}^{(m+1)} + \psi_{j-1}^{(m+1)} - 2\psi_j^{(m+1)}}{\Delta x^2} \right]$$

- Wstawiamy TF, ozn. $\frac{\Delta t}{2i\hbar} \frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2} = -i\alpha$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m)} \left[w_j^k + i\alpha \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right] - \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}_k^{(m+1)} \left[-i\alpha \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

Analiza von Neumanna schematu C-N w 1D

- Każdy wyraz sumy powinien być identyczny, $k = 0, 1, \dots, J - 1$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} \left[w_j^k - i\alpha \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right] = \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[w_j^k + i\alpha \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

- Zauważamy, że $w_j^k = e^{i2\pi jk/J}$, więc $w_{j\pm 1}^k = w_j^k e^{\pm i2\pi k/J}$

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} e^{2\pi ijk/J} \left[1 - i\alpha \left(e^{2i\pi k/J} + e^{-2i\pi k/J} - 2 \right) \right] &= \tilde{\Psi}_k^{(m)} e^{2\pi ijk/J} \left[1 + i\alpha \left(e^{2i\pi k/J} + e^{-2i\pi k/J} - 2 \right) \right] \\ \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} \left[1 - i\alpha \left(2 \cos(2\pi k/J) - 2 \right) \right] &= \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[1 + i\alpha \left(2 \cos(2\pi k/J) - 2 \right) \right] \end{aligned}$$

- Współczynnik wzmocnienia $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$

Analiza von Neumanna schematu C-N w 1D

► Powrót

- Współczynnik wzmocnienia $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$ powinien spełniać $|M^k| \leq 1$

$$M^k = \frac{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}$$

$$|M^k|^2 = \frac{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]} \frac{1 - i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]}{1 + i\alpha [2 \cos(2\pi k/J) - 2]} = 1$$

$$|M^k| \leq 1$$

- Schemat C-N jest stabilny dla każdego Δt .**

Analiza von Neumanna schematu A-C w 1D

- Przypomnienie: rozwiązanie w postaci TF

$$\Psi_j^{(m)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} w_j^k, \quad \Psi_j^{(m+1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k, \quad \Psi_j^{(m-1)} = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k, \quad w_j^k = \exp\left(i \frac{2\pi jk}{J}\right)$$

- Do schematu, rów. (17); zakładamy $V \equiv 0$, $V_t \equiv 0$

$$\Psi_j^{(m+1)} = \Psi_j^{(m-1)} - \frac{2\Delta t}{i\hbar} \frac{\hbar}{2m^*} \left[\frac{\Psi_{j+1}^{(m)} + \Psi_{j-1}^{(m)} - 2\Psi_j^{(m)}}{\Delta x^2} \right]$$

- Wstawiamy TF, ozn. $\frac{2\Delta t}{i\hbar} \frac{\hbar}{2m^* \Delta x^2} = -i\beta$

$$\sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k + \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[i\beta \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

Analiza von Neumanna schematu A-C w 1D

- Każdy wyraz sumy powinien być identyczny, $k = 0, 1, \dots, J - 1$

$$\tilde{\Psi}_k^{(m+1)} w_j^k = \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} w_j^k + \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[i\beta \left(w_{j+1}^k + w_{j-1}^k - 2w_j^k \right) \right]$$

- Przypomnienie, $w_j^k = e^{2\pi ijk/J}$, więc $w_{j\pm 1}^k = w_j^k e^{\pm 2\pi ik/J}$

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} e^{2\pi ijk/J} &= \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} e^{2\pi ijk/J} + \tilde{\Psi}_k^{(m)} e^{2\pi ijk/J} \left[i\beta \left(e^{2\pi ik/J} + e^{-2\pi ik/J} - 2 \right) \right] \\ \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} &= \tilde{\Psi}_k^{(m-1)} + \tilde{\Psi}_k^{(m)} \left[2i\beta \left(\cos(2\pi k/J) - 1 \right) \right] \end{aligned}$$

- Współczynnik wzmocnienia $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)}$

Analiza von Neumanna schematu A-C w 1D

► Powrót

- Współczynnik wzmacnienia $M^k = \tilde{\Psi}_k^{(m+1)} / \tilde{\Psi}_k^{(m)} = \tilde{\Psi}_k^{(m)} / \tilde{\Psi}_k^{(m-1)}$

$$(M^k)^2 - 2i\beta M^k [\cos(2\pi k/J) - 1] - 1 = 0$$

- Równanie kwadratowe. Rozwiązania:

$$(M^k)_{1,2} = i\beta[\cos(2\pi k/J) - 1] \pm \sqrt{1 - \beta^2 [\cos(2\pi k/J) - 1]^2}$$

- Kwadrat modułu:

$$(M^k)_{1,2}(M^k)_{1,2}^* = 1 \dots$$

- ALE:** wartość pod pierwiastkiem może być ujemna, gdy: $\cos(2\pi k/J) \approx -1$ i β duże⁹.

- Graniczny przypadek $(\cos(\pi) - 1)^2 = 4$

- Wymagamy

$$1 - 4\beta^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \beta \leq \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

⁹Robert J. Rubin, J. Chem. Phys. 70, 4811 (1979).

Analiza von Neumanna schematu A-C

▶ Powrót

- W 1D Otrzymaliśmy

$$\frac{\Delta x^2}{\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Warunek stabilności w 3D

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)^{-1} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Dla $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ otrzymujemy

$$\frac{\Delta x^2}{\sqrt{3}\Delta t} \geq \frac{2\hbar}{m^*}$$

- Jest to oszacowanie przy $V \equiv 0$. W ogólnych przypadkach stabilność może mieć większe ograniczenia.