

УДК 539.2

## ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В 2D-СЕКТОРИАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ

Р.М. МОВСЕСЯН, А.С. СААКЯН

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 24 мая 2003 г.)

Исследованы одноэлектронные состояния в 2D-секториальной квантовой яме. Показано, что в зависимости от глубины ямы возможно как выталкивание электрона из острия в область радиальной границы, так и его проникновение в область острия.

1. Хорошо известно, что пространственная ограниченность системы сильно влияет на ее одноэлектронный спектр и, следовательно, на все ее физические свойства [1]. Современные технологии позволяют получать пленки различных веществ толщиной менее  $100\text{\AA}$ , т.е. вплоть до монослоя; замечательно, что можно контролировать не только толщину пленки, но и ее геометрическую форму [2].

В связи с этим представляет интерес 2D-система атомов, напыленных в виде кругового сектора; дополнительный сектор образован атомами другого сорта. Круговая симметрия системы должна привести к своеобразной 2D-туннельной связи между смежными секторами, что безусловно отразится и на свойствах системы. В настоящей работе рассмотрены простейшие модели, описывающие эти системы, и в их рамках исследован одноэлектронный спектр. Показано, что 2D-электронный газ в такой системе сильно неоднороден.

2. В качестве простейшей модели выберем 2D-бесконечно глубокую потенциальную яму в форме кругового сектора с центральным углом  $\varphi_0$  и радиусом  $R$ :

$$U(r, \varphi) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \varphi \leq \varphi_0, \\ \infty, & \varphi_0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases} \quad (1)$$

На одноэлектронную волновую функцию следует наложить очевидные граничные условия

$$\begin{aligned} \Psi(r, 0) &= \Psi(r, \varphi_0) = 0, \\ \Psi(R, \varphi) &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

последнее из которых обусловлено ограниченностью системы в радиальном направлении.

Тогда волновые функции имеют следующий вид:

$$\Psi(r, \varphi) = C_{nm} \sin\left(\frac{\pi n}{\varphi_0} \varphi\right) J_{\frac{\pi n}{\varphi_0}}(k_{nm} r), \quad (3)$$

где  $n$  пробегает ряд целых чисел,  $J_\lambda(z)$  – функция Бесселя действительного аргумента,  $k_{nm}^2 = 2mE_{nm}/\hbar^2$ ,  $E$  – энергия электрона,  $k_{nm} = \chi_{nm}/R$ ,  $\chi_{nm}$  – нули функции Бесселя, а собственные значения энергии определяются из (2) и (3):

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2 \chi_{nm}^2}{2m^* R^2}. \quad (4)$$

Физически интересной областью является область больших значений  $n$  порядка  $\pi/\varphi_0 \gg 1$ , что соответствует малому угловому раствору сектора. В этой области

$$\Psi \sim \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\varphi_0}{2\pi}} \left[ \frac{e\varphi_0 k_{nm} r}{2\pi n} \right]^{\frac{\pi n}{\varphi_0}}, \quad (5)$$

то есть волновая функция возрастает по степенному закону в сторону радиальной границы  $r = R$ . Причина такого поведения достаточно проста: по мере приближения к вершине постепенно уменьшается поперечная область локализации электрона  $r\varphi_0$ , а его энергия  $E \sim \hbar^2/m\varphi_0^2 r^2$  возрастает, то есть продвижение электрона к вершине энергетически невыгодно. С другой стороны, это означает, что на электрон действует квазиклассическая сила  $F \sim r^{-3}$ , выталкивающая электрон из острия. 2D-электронный газ сильно неоднороден и сконцентрирован в основном в области, ширина которой  $a \geq R/\chi_{nm}$ ; учитывая, что во всяком случае для достаточно больших  $n$   $\chi_{nm} \sim \pi/\varphi_0$ , получим  $a \geq R\varphi_0/\pi$ , то есть  $a \ll R$ .

3. Рассмотрим ту же задачу в рамках модели потенциальной ямы конечной глубины:

$$U(\varphi) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \varphi \leq \varphi_0, \\ U, & \varphi_0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases} \quad (6)$$

В этом случае существует туннельная связь между обеими областями и это вносит некоторые изменения в полученные в пункте 2 результаты. Уравнение Шредингера не удастся решить точно. Стандартный подход, основанный на разделении переменных, не приводит к конкретным результатам, и решение следует строить, пользуясь следующими простыми соображениями: электрон, движущийся в азимутальном направлении “чувствует” действие потенциала (6), поэтому в отличие от стандартного подхода, потенциал (6) должен войти не в радиальную, а в азимутальную часть уравнения

Шредингера. Такой подход аналогичен хорошо известному адиабатическому приближению [3], а условием адиабатичности системы является  $\varphi_0 \ll 1$ . Итак, волновую функцию представим в виде

$$\Psi(r, \phi) = \Psi_1(r, \phi) \Psi_2(r), \quad (7)$$

где  $\Psi_1(r, \phi)$  удовлетворяет "азимутальному" уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \phi^2} + V(\phi) \Psi_1 = E_0 \Psi_1, \quad (8)$$

а  $E_0$  зависит от  $r$  как от параметра. Уравнение (8) соответствует ротатору с моментом инерции  $I = mr^2$ , движущемуся в поле  $V(\phi)$ .

Потенциал (6) периодичен с периодом  $2\pi$ . Учитывая топологию системы, выберем граничные условия в виде

$$\begin{aligned} \Psi_I(0) &= \Psi_{II}(2\pi), & \Psi'_I(0) &= \Psi'_{II}(2\pi), \\ \Psi_I(\varphi_0) &= \Psi_{II}(\varphi_0), & \Psi'_I(\varphi_0) &= \Psi'_{II}(\varphi_0). \end{aligned} \quad (9)$$

В области I потенциал (6) равен нулю. Тогда волновую функцию в "элементарной ячейке"  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Psi_I &= 2e^{i(\eta+\beta)} \sin(\lambda\phi - \eta - \beta), \\ \Psi_{II} &= \sqrt{1 + (\lambda^2/\mu^2)} e^{-i(\eta+\beta)} [\sin(2\eta + \beta) e^{i\mu\phi} + \sin \beta e^{-i\mu\phi}], \end{aligned} \quad (10)$$

где введены обозначения:

$$\lambda = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar} r, \quad \mu = \frac{\sqrt{2m(V-E_0)}}{\hbar} r, \quad \operatorname{tg} \eta = \frac{\lambda}{\mu}, \quad \operatorname{tg} \beta = \frac{\sin \lambda \varphi_0}{e^{\mu b} - \cos \lambda \varphi_0}, \quad (10a)$$

а дисперсионное уравнение, определяющее собственные значения  $E_0$ , имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{ch}(\mu b) \cos \lambda \varphi_0 + \frac{\mu^2 - \lambda^2}{2\mu\lambda} \operatorname{sh}(\mu b) \sin \lambda \varphi_0 &= 1, \\ b &= 2\pi - \varphi_0, \end{aligned} \quad (11)$$

т.е. внешне совпадает с дисперсионным уравнением модели Кронига-Пенни с равным нулю блоховским волновым вектором. Тот же результат для волновых функций и спектра можно получить, действуя стандартным способом [4].

Уравнение (11) удастся решить в некоторых предельных случаях, одним из которых является случай достаточно глубокой ямы и достаточно узкой области ее локализации ( $\varphi_0 \ll 1$ ). Тогда уровни энергии имеют вид

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m\varphi_0^2 r^2} \quad n=1, 2, \dots, \quad (12)$$

т.е. соответствуют уровням в бесконечно глубокой потенциальной яме. В

рассматриваемом приближении параметр  $\lambda$  не зависит от  $r$  и уравнение для  $\Psi_2(r, \varphi)$  имеет следующий вид в I области:

$$\frac{d^2 \Psi_2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d \Psi_2}{dr} + \frac{2m}{\hbar} (E - E_0) \Psi_2 = 0, \quad (13)$$

где  $E_0$  определяется выражением (12).

Уровни энергии  $E_0$  играют роль эффективного потенциала взаимодействия в формировании радиальных состояний  $\Psi_2(r)$ . Отметим, что в этом случае  $\Psi_2$  в I области зависит только от  $r$ . Тогда, решая уравнение (13), получим

$$\Psi_2(r) = J_{m/\varphi_0}(kr). \quad (14)$$

В области II (область барьера) уравнение для  $\Psi_2(r)$  совпадает с уравнением (13) приближенно – при условии  $\varphi - \varphi_0 \ll \pi$ . Это значит, что в достаточно узких областях, прилегающих к границам I области, волновую функцию с большой степенью точности можно считать совпадающей с (14). Полученные здесь результаты совпадают с результатами, полученными в п.2, и значит, рассматриваемое приближение работает хорошо.

4. Рассмотрим теперь случай барьера, низкого настолько, что имеет смысл говорить об уровне  $E_0$ , расположенном достаточно близко к поверхности ямы:  $E_0 = V - \delta$ ,  $\delta \ll V$ . Очевидно, что в рассмотренном в п.3 предельном случае такой уровень отсутствует. Уравнение (11) в этом случае обладает следующим решением:

$$E_0 = V + \frac{\varphi_0}{6b} V - \frac{6\hbar^2}{mb^2 r^2}. \quad (15)$$

В случае малого углового раствора, а также вблизи вершины сектора второй член можно отбросить, и тогда

$$\delta = \frac{6\hbar^2}{mb^2 r^2}. \quad (15a)$$

Полученный результат верен в области  $r \gg 0,06\lambda$ , где  $\lambda$  – де-Бройлевская длина волны электрона с энергией вблизи поверхности ямы; это следует из условия  $\delta \ll V$ .

В рассмотренном приближении туннельный фактор  $\mu$ , определяемый выражением (10a), не зависит от  $r$ , что объясняется достаточно сильным проникновением электрона в область барьера. Этим же объясняется и знак минус в третьем слагаемом в (15). Итак, туннельная связь между областями велика и считать ее экспоненциально малой нельзя.

Уравнение Шредингера во II области обладает следующим решением:

$$\Psi_2(r) = J_{i\beta}(kr) - e^{-\pi\beta} J_{-i\beta}(kr), \quad (16)$$

где  $\beta = \chi/b^2$ .

Коэффициенты в линейной комбинации выбраны из условия отсутствия на достаточно больших расстояниях от вершины сектора отраженной волны. Этим делается попытка выяснить, существуют ли состояния, когда электрон находится на малых расстояниях от вершины. В области  $kr \ll 1$  волновая функция (16) приобретает вид

$$\Psi_2(r) = \sin[\beta \ln(kr/2) - \alpha + i(\pi\beta/2)], \quad (17)$$

а из условия обращения (17) в ноль на радиальной границе следует, что спектр энергий имеет следующий вид:

$$E = V - \frac{2\hbar^2}{mR^2} e^{\frac{2(\alpha - \pi)}{\beta}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad (18)$$

$$2\alpha = \arg \frac{\Gamma(1 + i\beta)}{\Gamma(1 - i\beta)}; \quad \Gamma(z) - \text{гамма-функция.}$$

Отметим, что полученный нами спектр является точным, а не его “длинно-волновой” частью, поскольку условие  $kr \ll 1$  возникает из-за рассмотрения области, непосредственно прилегающей к вершине сектора ( $r \rightarrow 0$ ). Область проникновения электрона в вершину равна

$$r \ll \text{Re}^{(\pi - \alpha)/\beta}. \quad (19)$$

Таким образом, в рассмотренном здесь предельном случае электрон может проникнуть в область вблизи вершины. Причиной тому, как показано выше, является сильная туннельная связь между двумя областями, и в конечном счете возникновение эффективного потенциала  $U_{ef} \sim -(1/r^2)$ , соответствующего притяжению.

Таким образом, процесс проникновения электрона в вершину сектора обусловлен конкуренцией двух факторов – туннелированием и ростом кинетической энергии.

Автор выражает признательность А.О.Меликяну и Х.В.Неркаряну за обсуждение результатов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Т.Андо, А.Фаулер, Ф.Стерн. Электронные свойства двумерных систем. М., Мир, 1985.
2. Y.Imry. Introduction to Mesoscopic Physics. Oxford, University Press, 2002.
3. В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1981.
4. И.И.Гольдман, В.Д.Кривченков. Сборник задач по квантовой механике. М., ГИТТЛ, 1957.

Ռ.Մ. ՄՈՎՍԵՍՅԱՆ, Ա.Ս. ՍԱՀԱԿՅԱՆ

Դիտարկված է երկու տարրեր նյութերի ատոմներից կազմված և տակդիրի վրա երկու հարակից սեկտորների ձևով փոշեպատված 2D համակարգ: Պարզագույն բնագծային մոդելների սահմաններում հետազոտված է համակարգի էլեկտրոնային սպեկտրը:

# ONE-ELECTRON STATES IN 2D-SECTORIAL QUANTUM WELL

R.M. MOVSESYAN, A.S. SAHAKYAN

One-electron states in a 2D-sectorial quantum well are studied. It is shown that, depending on the well depth, it is possible both the expulsion of an electron from the point to the region of the radial boundary and its penetration to the region of the point.