Известия НАН Армении, Физика, т.47, №5, с.350-358 (2012)

УДК 621.315

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕПРОНИЦАЕМЫХ ЧАСТИЦ В БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Д.Б. АЙРАПЕТЯН[1,2], Э.М. КАЗАРЯН[1]

[1]Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван

[2]Государственный инженерный университет Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 8 февраля 2012 г.)

В рамках адиабатического приближения рассмотрен энергетический спектр и волновые функции двух непроницаемых частиц в бесконечно глубокой потенциальной яме для двух случаев аппроксимации эффективного ограничивающего потенциала “медленной” подсистемы. В случае аппроксимации эффективного ограничивающего потенциала с учетом квадратичного члена энергетический спектр системы получается эквидистантым. Распределение вероятности в области “быстрой” частицы имеет симметричный вид, а распределение вероятности в области “медленной” частицы носит асимметричный характер, и максимум локализации системы в основном состоянии смещен в сторону “быстрой” частицы. В первом возбужденном состоянии центр распределения вероятности “медленной” частицы сдвинут в сторону непроницаемой стенки.

1. Введение

Методами современных полупроводниковых технологий создаются низкоразмерные полупроводниковые структуры, в которых движение носителей заряда ограничено в одном, в двух и в трех направлениях [1-3]. Важной особенностью таких систем, по сравнению с массивными полупроводниками, является коренное изменение происходящих в них физических процессов из-за размерного квантования (РК).

На первом этапе исследований низкоразмерных структур важно определение характера электронных состояний в изучаемых образцах. При этом, однако, аналитическое описание электронных состояний не всегда возможно реализовать. Вместе с тем, довольно удачно применяются различные приближенные методы определения волновых функций и энергетического спектра носителей заряда в системах различной размерности. В частности, вариационный метод, теория возмущений, адиабатическое приближение и т.п. [4] позволяют получать хоть и приближенные, но довольно хорошие аналитические выражения для различных физических параметров наноструктур.

Одним из наиболее эффективных приближенных методов описания квантово-механических систем является адиабатический метод. Его можно применять в том случае, если систему можно разделить на две составные части, одна из которых характеризуется большой, а другая – малой частотами. Так обстоит дело например, в системах с существенно различающимися эффективными массами входящих в нее частиц, продольными и поперечными диэлектрическими проницаемостями, геометрическими масштабами локализации носителей заряда в различных направлениях и т.д. [5]. В отличие от других широко известных приближенных методов, при адиабатическом приближении взаимодействие между подсистемами не предполагается малым [6], поэтому результаты, полученные в рамках этого приближения, в некотором смысле носят общий характер. При этом, особым классом стационарных адиабатических задач являются те, которые решаются в рамках так называемой “геометрической адиабатики” [7-14], когда применимость указанного приближения диктуется особой геометрией рассматриваемой квантовой системы.

В данной работе рассматривается задача определения энергетических уровней двух непроницаемых частиц с существенно различными массами находящихся в бесконечно глубокой потенциальной яме. Отметим, что большая разница между массами частиц и их непроницаемость обеспечивают условие применимости приближения “геометрической адиабатики”.

2. Теория

Рассмотрим поведение двух непроницаемых частиц с массами m и M ($m \ll M$) в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме с шириной a. В режиме сильного РК задача сводится к нахождению энергетических состояний и волновых функций двух частиц по отдельности. Мы будем предполагать, что взаимодействие между частицами является точечным, в рамках модели непроницаемых сфер (см. рис.1).

Потенциальная энергия для каждой из частиц запишется в следующем виде:

$$U\left(x_{1,2}\right)=\begin{cases}0,\ 0\le x_{1,2}\le a,\\ \infty,\ x_{1,2}<0,\ x_{1,2}>a.\end{cases} \qquad (1)$$

Из-за существенной разницы между массами первой и второй частиц характерная частота движения первой частицы превалирует над частотой движения второй. Это позволяет применить адиабатическое приближение. Для определенности предположим, что $x_2 < x_1$, где x_1 – координата “быстрой”, а x_2 – координата “медленной” подсистемы [6].

Гамильтониан системы можно представить в виде суммы гамильтонианов “быстрой” $\hat{H}_1$ и “медленной” $\hat{H}_2$ подсистем

$$\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2+U, \qquad (2)$$

где

$$\hat{H}_1=-\left(\hbar^2/2m\right)\partial^2/\partial x_1^2\ , \qquad (3)$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}. \tag{4}$$

Полную волновую функцию системы представим в виде произведения волновых функций “быстрой” и “медленной” подсистем:

$$\Phi(x_1, x_2) = \Psi_{n_1}(x_1; x_2)\Psi_{n_1,n_2}(x_2), \tag{5}$$

где $\Psi_{n_1}(x_1; x_2)$ – волновая функция легкой частицы, параметрически зависящая от координаты x_2, $\Psi_{n_1,n_2}(x_2)$ – волновая функция тяжелой частицы, n_1 и n_2 – соответственно, квантовые числа “быстрой” и “медленной” подсистем.

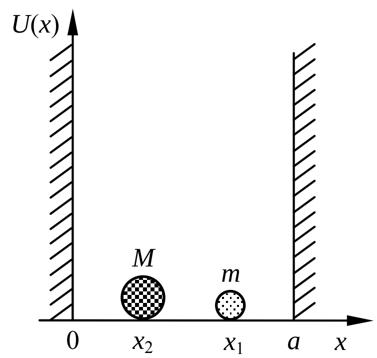

Рис.1. Бесконечно глубокая потенциальная яма
с двумя непроницаемыми частицами.

Так как частицы непроницаемые, то частица “быстрой” подсистемы не может находиться в области левее частицы “медленной” подсистемы. Это означает, что волновая функция “быстрой” подсистемы в этой области равна нулю:

$$\Psi_{n_1}(x_1 < x_2) = 0. \tag{6}$$

Таким образом, движение первой частицы локализовано в области $x_2 < x_1 < a$. Решая уравнение Шредингера, характеризующее “быструю” подсистему, для энергетического спектра и волновой функции первой частицы окончательно получим:

$$E_{n_1}(x_2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m(a - x_2)^2} n_1^2, \tag{7}$$

$$\Psi_{n_1}(x_1; x_2) = \sqrt{2/(a - x_2)}\sin\left[\pi n_1 (x_1 - x_2)/(a - x_2)\right]. \tag{8}$$

Из адиабатического приближения следует, что энергия “быстрой” подсистемы (7) играет роль эффективного потенциала, входящего в уравнение Шредингера “медленной” подсистемы. Для условия $x_2 =\ a$ выражение (7) можно разложить в ряд Тейлора:

$$E_{n_1}\left(x_2\right) \approx \frac{\pi^2\hbar^2 n_1^2}{2ma^2} + \frac{\pi^2\hbar^2 n_1^2}{ma^3} x_2 + \frac{3\pi^2\hbar^2 n_1^2}{2ma^4} x_2^2 . \tag{9}$$

Учет линейного члена в эффективном потенциале. Вначале ограничимся рассмотрением учета линейного адиабатического члена в разложении (9). Тогда эффективный потенциал “медленной” подсистемы примет вид:

$$U_{eff}\left(x_2\right) = \frac{\pi^2\hbar^2 n_1^2}{2ma^2} + \frac{\pi^2\hbar^2 n_1^2}{ma^3} x_2 . \tag{10}$$

После несложных преобразований для уравнения Шредингера “медленной” подсистемы получим уравнение Эйри [15]:

$$\Psi''_{n_1,n_2}\left(x_2\right) - \beta x_2 \Psi_{n_1,n_2}\left(x_2\right) = \varepsilon \Psi_{n_1,n_2}\left(x_2\right). \tag{11}$$

Здесь введены следующие обозначения: $\beta = 2M\pi^2 n_1^2 / ma^3$ и $\varepsilon = -\left(2M/\hbar^2\right)\times \left[E_{n_1 n_2} - \pi^2\hbar^2 n_1^2 / 2ma^2\right]$. Решение уравнения (11) для “медленной” подсистемы, удовлетворяющее стандартным условиям, имеет вид

$$\Psi_{n_1,n_2}\left(\tilde{x}_2\right) = \frac{\mathrm{Ai}\left(\tilde{x}_2\right)}{\sqrt{\mathrm{Ai}'^2\left(\varepsilon\beta^{-2/3}\right) - \varepsilon\beta^{-2/3}\mathrm{Ai}^2\left(\varepsilon\beta^{-2/3}\right)}} , \tag{12}$$

где $\tilde{x}_2 = \beta^{-2/3}\left(\varepsilon + \beta x_2\right)$, а $\mathrm{Ai}\left(\tilde{x}_2\right)$ – функция Эйри первого рода.

Окончательно, из граничных условий, накладываемых на волновую функцию, для полной энергии системы получаем:

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_1^2}{2ma^2} + \left(\frac{\pi^4\hbar^6 n_1^4}{2m^2 M a^6}\right)^{1/3} \lambda_{n_2} , \tag{13}$$

где λ_{n_2} – нули функции Эйри первого рода [15].

Учет квадратичного члена в эффективном потенциале. В следующем приближении учтем квадратичный член в эффективном потенциале, представив его в следующей форме:

$$U_{eff}\left(x_2\right) = \frac{3\pi^2\hbar^2 n_1^2}{2ma^4}\left[\left(x_2 + \frac{a}{3}\right)^2 + \frac{2a^2}{9}\right]. \tag{14}$$

Подставляя эффективный потенциал (14) в уравнение Шредингера для “быстрой” подсистемы, после несложных преобразований получим уравнение

$$\Psi''_{n_1 n_2} + \left(\varepsilon - \delta\left(x_2 + a/3\right)^2\right)\Psi_{n_1 n_2} = 0 , \tag{15}$$

где введены следующие обозначения: $\varepsilon = -\left(M/m\right)\left(2\pi^2 n_1^2/3a^2\right) + \left(2E_{n_1 n_2} M/\hbar^2\right)$, $\delta = \left(M/m\right)\left(3\pi^2 n_1^2/a^4\right)$. После замены переменной $z_2 = \sqrt[4]{\delta}\left(x_2 + a/3\right)$ приходим к известному уравнению одномерного гармонического осциллятора

$$\Psi''_{n_1 n_2} + \left(\zeta - z_2^2\right)\Psi_{n_1 n_2} = 0 , \tag{16}$$

где $\zeta = \varepsilon/\sqrt{\delta}$. Решения уравнения (16) задаются полиномами Эрмита порядка n_2 [15]:

$$\Psi_{n_1 n_2}(z_2) = \sqrt{\frac{\sqrt{\delta}}{2^{n_2}\sqrt{\pi} n_2!}} e^{-z_2^2/2} H_{n_2}(z_2), \qquad (17)$$

где n_2 принимает значения $n_2 = 0,1,2...$. Для полной энергии системы с учетом квадратичного члена в эффективном потенциале окончательно получим:

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{3ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi n_1}{Ma^2}\sqrt{\frac{3M}{m}}\left(n_2 + \frac{1}{2}\right). \qquad (18)$$

3. Обсуждение

Перейдем к обсуждению полученных результатов. Как видно из выражений (13) и (18), полная энергия системы в обоих случаях обратно пропорциональна квадрату ширины потенциальной ямы α. Отметим, что полученные результаты верны только для нижних уровней спектра, т.е. для небольших значений квантовых чисел.

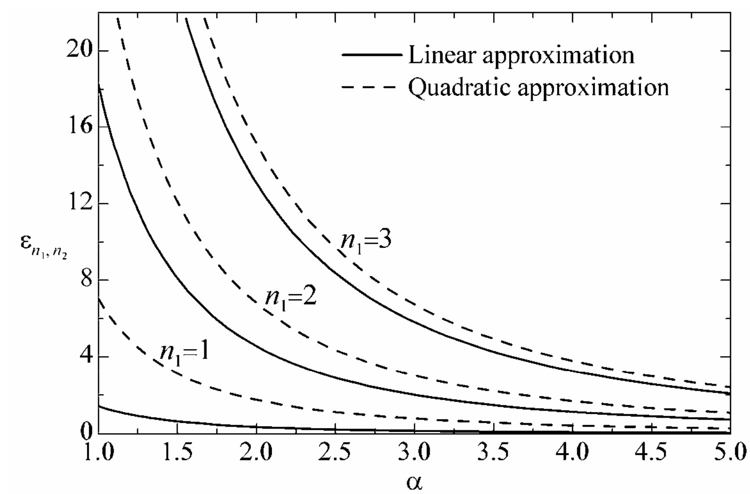

Рис.2. Зависимость полной энергии системы от ширины потенциальной ямы для обоих случаев аппроксимации эффективного потенциала.

На рис.2 приведены кривые зависимости безразмерной энергии системы от ширины потенциальной ямы, когда $m/M = 0.12$, для обоих случаев аппроксимации эффективного потенциала. Численные расчеты сделаны для квантовой ямы из GaAs. На рисунке введены обозначения $\varepsilon_{n_1,n_2} = E_{n_1,n_2}/E_R$ и $\alpha = a/a_e$, где $E_R = 5.275$ мэВ – эффективная энергия Ридберга, $a_e = 104$ Å – эффективный боровский радиус электрона в GaAs. Как видно из рисунков, с увеличением ширины потенциальной ямы полная энергия системы в обоих случаях уменьшается, что является следствием уменьшения вклада РК. Отметим, что э нергия системы для случая линейного потенциала расположена ниже, чем при квадратичной аппроксимации потенциала ограничения, так как при параболической аппроксимации влияние стенок более существенно, чем при линейной. Из рисунка видно также, что при увеличении ширины потенциальной ямы кривые сливаются, и разность энергий в обоих случаях уменьшается. Это обусловлено тем, что с увеличением ширины потенциальной ямы вклад РК стенок становится слабее и форма ограничивающего эффективного потенциала начинает играть второстепенную роль.

Как видно из выражения (18), при параболической аппроксимации энергетический спектр эквидистантен. Отметим, что над каждым уровнем “быстрой” подсистемы расположены уровни “медленной”. На рис.3 приведены зависимости энергии первых трех семейств уровней системы от ширины потенциальной ямы. С ее увеличением энергетические уровни снижаются, что является следствием уменьшения вклада РК стенок. С уменьшением ширины потенциальной ямы уменьшаются также расстояния между эквидистантными уровнями (например, при $\alpha = 2$ $\Delta\varepsilon \approx 0.24$ ($n_1 = 1$), а при $\alpha = 4$ $\Delta\varepsilon \approx 0.058$ ($n_1 = 1$)). Существует также разница между межуровневыми расстояниями различных эквидистантных семейств. С увеличением номера семейства межуровневые расстояния увеличиваются. Так, например, при $\alpha = 2$, $\Delta\varepsilon \approx 0.24$ ($n_1 = 1$), а при $\alpha = 2$, $\Delta\varepsilon \approx 0.47$ ($n_1 = 2$).

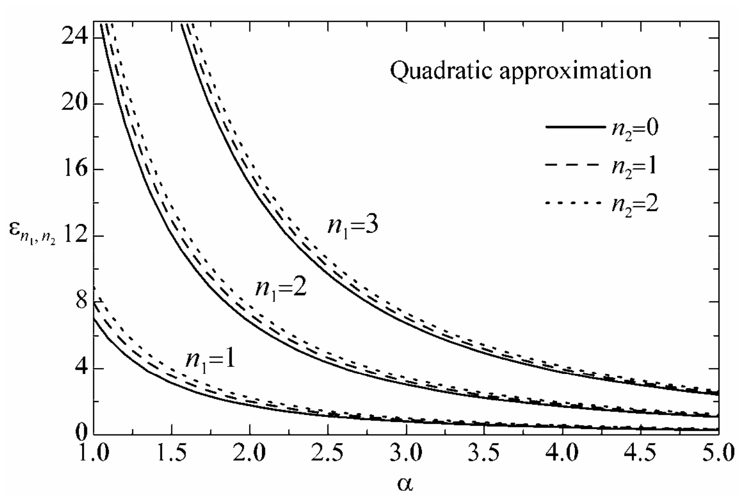

Рис.3. Зависимость первых трех эквидистантных уровней энергии от ширины потенциальной ямы для случая квадратичной аппроксимации эффективного потенциала.

Полная волновая функция системы состоит из произведений двух частей: волновой функции “быстрой” подсистемы (см. выражение (8)) и волновой функции “медленной” подсистемы (см. выражение (12) или (17)). На рис.4 представлены зависимости плотностей вероятности нахождения частиц в потенциальной яме от координат непроницаемых частиц для первых двух состояний. Отметим также, что для основного состояния (рис.4) распределение вероятности локализации “быстрой” частицы имеет симметричный, а распределение вероятности “медленной” частицы – ярко выраженный асимметричный характер. При этом центр распределения имеет сдвиг в правую сторону, иными словами, “тяжелая” частица стремится к “легкой”.

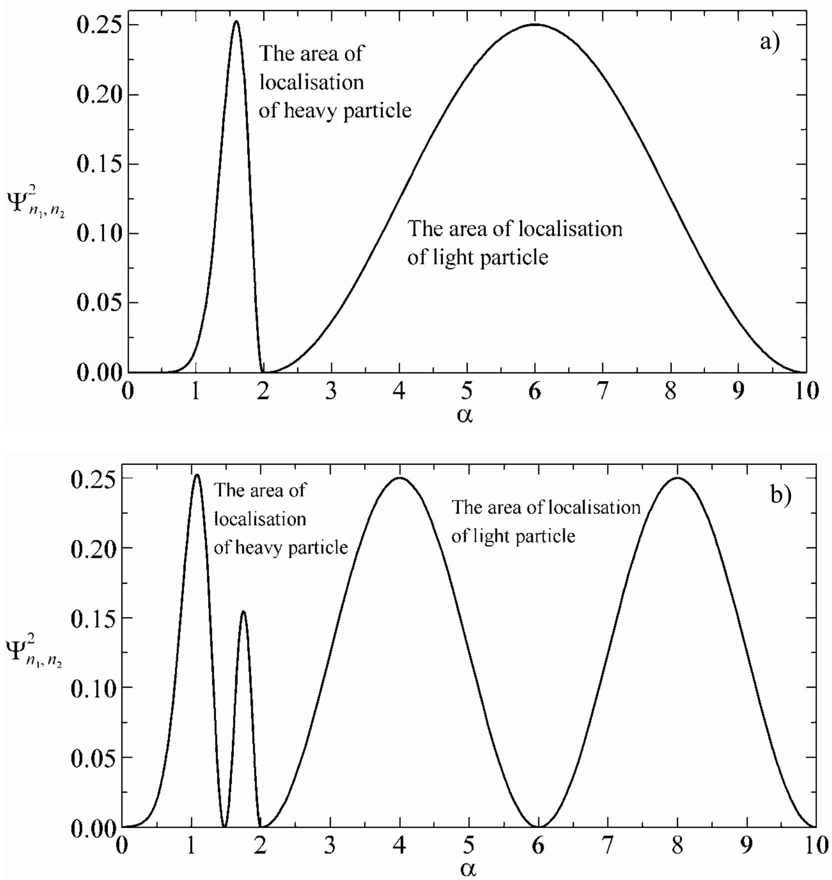

Рис.4. Зависимость квадрата волновой функции от координаты: a) для основного состояния, b) для первого возбужденного состояния.

На рис.4b приведен квадрат волновой функции системы для второго возбужденного уровня. И в этом случае распределение вероятности в области первой частицы симметрично, а асимметричный характер распределения вероятности тяжелой дырки имеет более явный вид. Однако теперь уже центр распределения вероятности “медленной” частицы имеет сдвиг в сторону непроницаемой стенки.

4. Заключение

В рамках адиабатического приближения получены выражения для энергетического спектра непроницаемых частиц с существенно отличающимися массами в бесконечно глубокой потенциальной яме. Найдены аналитические выражения для энергии и волновых функции системы для двух случаев аппроксимации эффективного ограничивающего потенциала “медленной” подсистемы – линейного и квадратичного.

Рассмотренный метод расчета энергетических уровней и волновых функций для двух непроницаемых частиц с различными массами может быть использован в ряде конкретных задач, которые будут исследованы в будущем. Например, нахождение энергетических уровней и волновых функций для тяжелой дырки и легкой дырки в квантовом кольце с непроницаемыми стенками. В этом случае непроницаемость частиц обеспечивается взаимным отталкиванием дырок за счет кулоновского взаимодействия. Вышеприведенный метод может быть применен при нахождении энергетических уровней и волновых функций тяжелой и легкой дырок в сильно вытянутой эллипсоидальной и цилиндрической квантовых точках.

В заключение авторы выражают благодарность проф. А.А. Саркисяну за плодотворные обсуждения и ценные замечания.

Работа выполнена в рамках государственной базовой программы Республики Армения “Исследования физических свойств квантовых наноструктур со сложной геометрией и разными ограничивающими потенциалами”.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison.** Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics. University of Leeds, Leeds, United Kingdom, 2005.
2. Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. **R.K.Willardson, E.R.Weber, eds.,** San Diego, Academic Press, 1999.
3. **E.M.Kazaryan, S.G.Petrosyan.** Physical Principles of Semiconductor Nanoelectronics. Yerevan, RAU, 2005.
4. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика. М., Наука, 1989.
5. **Ф.Бассани, Дж.Пастори-Паравичини.** Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах. М., Наука, 1982.
6. **В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган.** Задачи по квантовой механике, М., Наука, 1992.
7. **K.G.Dvoyan, D.B.Hayrapetyan, E.M.Kazaryan.** Nanoscale Res. Lett., **4**, 106 (2009).
8. **A.A.Gusev, O.Chuluunbaatar, S.L.Vinitsky, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan.** J. Phys.: Conf. Series, **248**, 012047 (2010).
9. **A.A.Gusev, O.Chuluunbaatar, S.L.Vinitsky, V.L.Derbov, E.M.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan.** Phys. Atom. Nucl., **73**, 331 (2010).
10. **Д.Б.Айрапетян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 442 (2007).
11. **K.G.Dvoyan, D.B.Hayrapetyan, E.M.Kazaryan, A.A.Tshantshapanyan.** Nanoscale Res. Lett., **4**, 130 (2009).
12. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян, Э.М.Казарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 227 (2007).
13. **E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan.** Int. J. Mod. Phys. B, **15**, 4103 (2001).
14. **E.M.Kazaryan, A.V.Meliksetyan, L.S.Petrosyan, H.A.Sarkisyan.** Physica E, **31**, 228 (2007).
15. Справочник по специальным функциям. под ред. **М.Абрамовица, И.Стиган**. М., Наука, 1979.

ԱՆՎԵՐՋ ԽՈՐ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ ԱՆԹԱՓԱՆՑ ՄԱՍՆԻԿՆԵՐԻ ԱԴԻԱԲԱՏԱԿԱՆ ՆԿԱՐԱԳՐՈՒԹՅՈՒՆԸ

Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Է.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ

Ադիաբատական մոտավորության շրջանակներում քննարկված է անվերջ խոր պոտենցիալային փոսում երկու անթափանց մասնիկների էներգիական սպեկտրը: Ստացված են վերլուծական արտահայտություններ համակարգի էներգիայի և ալիքային ֆունկցիաների համար՝ «դանդաղ» ենթահամակարգի արդյունարար սահմանափակող պոտենցիալի երկու մոտարկումների դեպքում: Այն դեպքում, երբ արդյունարար սահմանափակող պոտենցիալը մոտարկված է քառակուսային անդամի հաշվառմամբ, համակարգի էներգիական սպեկտրը հավասարահեռ է: Հավանականության բաշխումը «արագ» ենթահամակարգի տիրույթում ունի համաչափ, իսկ «դանդաղ» մասնիկի տիրույթում՝ անհամաչափ տեսք. տեղայնացման մաքսիմումը հիմնական վիճակում շեղված է դեպի «արագ» մասնիկը: Առաջին գրգռված վիճակի համար «դանդաղ» մասնիկի հավանականության բաշխման կենտրոնը շեղված է դեպի անթափանց պատը:

ADIABATIC DESCRIPTION OF IMPENETRABLE PARTICLES IN AN INFINITELY DEEP POTENTIAL WELL

D.B. HAYRAPETYAN, E.M. KAZARYAN

In the framework of adiabatic approximation the energy spectrum of two impenetrable particles in an infinitely deep potential well is considered. The analytical expressions for the energy and wave function of the system for two cases of approximation of the effective confining potential of the "slow" subsystem are obtained. In the case of approximation of the effective confining potential, taking into account the quadratic term, equidistant energy spectrum is obtained. The probability distribution of "fast" particle has a symmetric form, and the probability distribution of the "slow" particle is asymmetrical and localization of the maximum in the ground state is shifted to the "fast" particle. In the case of the first excited state the center of the probability distribution of the "slow "particle has a shift towards to the impenetrable wall.