

УДК 539.2

ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВОЙНОЙ ЛИНЕЙНОЙ δ -ЯМЕ

Р.М. МОВСЕСЯН, А.С. СААКЯН

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 12 апреля 2004 г.)

Рассмотрена система, состоящая из двух линейных δ -ям, образующих некоторый угол φ_0 . Исследованы одноэлектронные состояния в этой системе. Показано, что туннельная связь между ямами позволяет электрону проникнуть в область, непосредственно прилегающую к вершине этой ямы.

1. Современные технологии позволяют получать низкоразмерные системы различных геометрий [1,2]. Среди них особое место занимают системы, обладающие круговой симметрией, существенно влияющей на электронный энергетический спектр и, в конечном счете, на все физические свойства [3,4]. Выбором различных напыляемых веществ можно добиться образования электронных квантовых ям и туннельных структур, обладающих интересными свойствами благодаря именно круговой симметрии системы. В работе [5] рассмотрено поведение электрона в 2D-квантовой яме, обладающей формой кругового сектора. Симметрия системы приводит к тому, что поведение азимутальной степени свободы электрона подобно поведению частицы в одномерном периодическом поле [6]. В радиальном направлении электрон при определенных условиях может "скатываться" в область, непосредственно прилегающую к вершине сектора. В результате возникает ситуация, внешне похожая на известное квантовомеханическое падение на центр [7], однако система обладает основным состоянием. В результате в области вершины сектора происходит своеобразное накопление электронов и, в конечном счете, образование сильно-неоднородного электронного газа.

В настоящем сообщении рассмотрена система, состоящая из двух достаточно узких линейных квантовых ям, расположенных под некоторым углом φ_0 друг к другу. Для простоты будем считать, что ямы бесконечно узкие и локализованы на полупрямых $y = \pm kx$, $x > 0$, $k = \tan(\varphi_0/2)$. Тогда потенциал взаимодействия электрона с ямами имеет вид

$$U(x, y) = -U_0 R [\delta(y - kx) + \delta(y + kx)], \quad (1)$$

где U_0 – характерная глубина ямы, R – характерный радиальный размер системы.

Перейдем в полярную систему координат, в которой (1) примет следующий вид:

$$U(\rho, \varphi) = -\frac{U_0 R}{\rho} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [\delta(\varphi - 2\pi n) + \delta(\varphi - \varphi_0 - 2\pi n)], \quad (2)$$

где в явном виде учтена периодичность системы по азимутальной переменной, т.е. круговая симметрия системы. По азимутальной переменной (2) соответствует решетке с двумя "атомами" на элементарную ячейку (рис.1).

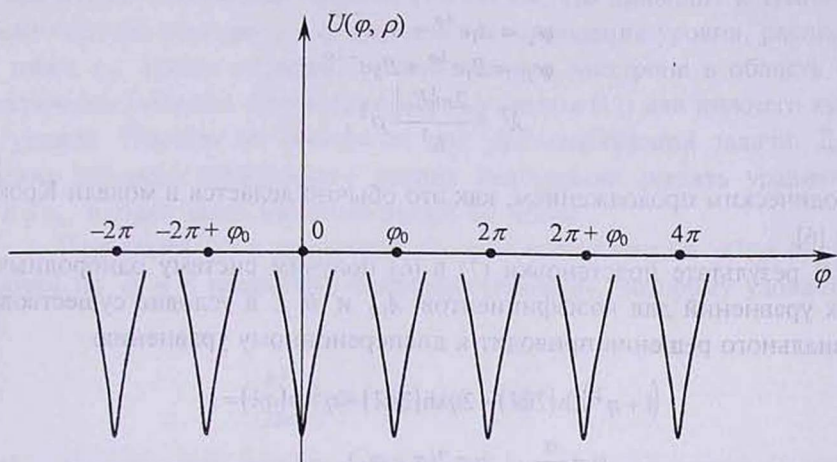


Рис.1. Схема потенциального рельефа (2).

В рамках этой простой модели найдены волновая функция и спектр электрона. Показано, что электрон может проникнуть в область вблизи вершины системы, т.е. возникает ситуация, близкая к описанной в работе [5]; это обусловлено геометрией системы и ее круговой симметрией.

2. Одноэлектронное уравнение Шредингера с потенциалом (1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + U(\rho, \varphi) \psi = E \psi \quad (3)$$

можно решить, используя адиабатическое приближение. Представим волновую функцию в виде

$$\psi(\rho, \varphi) = \psi(\varphi, \rho) \cdot \Phi(\rho), \quad (4)$$

где $\psi(\varphi, \rho)$ – волновая функция азимутальной степени свободы, удовлетворяющая уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + U(\rho, \varphi) \psi = (E_0 - \varepsilon_0) \psi, \quad (5)$$

где ε_0 – энергия связи электрона на одиночной δ -яме.

На волновую функцию $\psi(\varphi, \rho)$ следует наложить следующие граничные условия:

$$\begin{aligned}
\psi'(+0) - \psi'(-0) + \alpha\psi(0) &= 0, \\
\psi'(\varphi_0 + 0) - \psi'(\varphi_0 - 0) + \alpha\psi(\varphi_0) &= 0, \\
\psi_I(0) &= \psi_{II}(0), \\
\psi_{II}(\varphi_0) &= \psi_{III}(\varphi_0),
\end{aligned} \tag{6}$$

где введено обозначение $\alpha = (2mU_0 / \hbar^2)\rho$, а римские индексы нумеруют следующие области: $I[-2\pi + \varphi_0, 0]$, $II[0, \varphi_0]$, $III[\varphi_0, 2\pi]$.

Волновую функцию $\psi(\varphi, \rho)$ следует искать в виде

$$\begin{aligned}
\psi_I &= A_1 e^{\lambda\varphi} + A_2 e^{-\lambda\varphi}, \\
\psi_{II} &= B_1 e^{\lambda\varphi} + B_2 e^{-\lambda\varphi}, \\
\lambda^2 &= \frac{2m|E_0|}{\hbar^2} \rho^2,
\end{aligned} \tag{7}$$

с периодическим продолжением, как это обычно делается в модели Кронига-Пенни [6].

В результате подстановки (7) в (6) получим систему однородных линейных уравнений для коэффициентов $A_{1,2}$ и $B_{1,2}$, а условие существования нетривиального решения приводит к дисперсионному уравнению

$$\begin{aligned}
(1 + \eta^2) \operatorname{ch}(2\pi\lambda) - 2\eta \operatorname{sh}(2\pi\lambda) - \eta^2 \operatorname{ch}(a\lambda) &= 1, \\
\eta &= \frac{\alpha}{2\lambda}, \quad a = 2(\pi - \varphi_0).
\end{aligned} \tag{8}$$

Параметры λ и α зависят от радиальной переменной ρ , т.е. решения уравнения (8) для E_0 зависят от ρ как от параметра. Трансцендентность уравнения (8) не позволяет решить его точно, поэтому приходится прибегнуть к приближениям, соответствующим различным областям ρ и U . Исследование уравнения (8) упрощается, если учесть его факторизуемость:

$$\operatorname{th}(\pi\lambda) = \frac{2\eta \operatorname{ch}^2 \frac{\varphi_0 \lambda}{2}}{1 + \eta \operatorname{sh}(\varphi_0 \lambda)}, \quad \operatorname{th}(\pi\lambda) = \frac{2\eta \operatorname{sh}^2 \frac{\varphi_0 \lambda}{2}}{1 - \eta \operatorname{sh}(\varphi_0 \lambda)}. \tag{9}$$

Тогда просто показать, что уравнения (9) в области $\pi\lambda \gg 1$, $\varphi_0 \ll 1$ обладают решениями

$$\lambda = \frac{4}{\alpha\varphi_0^2}, \quad \lambda = \frac{2}{\alpha\varphi_0^2}, \tag{10}$$

или

$$E_{01}(\rho) = \varepsilon_0 - \frac{2\hbar^6}{m^3 U_0^2 R^2 \varphi_0^4 \rho^4}, \quad E_{02}(\rho) = \varepsilon_0 - \frac{\hbar^6}{2m^3 U_0^2 R^2 \varphi_0^4 \rho^4}, \tag{11}$$

причем $E_{01}(\rho)$ расположен глубже, чем $E_{02}(\rho)$.

С учетом (11) неравенство $\pi\lambda \gg 1$ сводится к следующему:

$$\rho \ll \rho_0, \quad \rho_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{mUR\varphi_0^2}, \quad (12)$$

хорошо выполняющемуся для достаточно малых φ_0 и неглубоких ям. Это значит, что (11) хорошо работает в области (12), т.е. в непосредственной близости от вершины системы.

Когда электрон находится на большом расстоянии от вершины сектора, он практически локализован по φ на уровне ε_0 . С приближением к острию происходит сближение потенциальных ям, что приводит к туннельному обобществлению электрона в результате возникновения уровня, расположенного ниже ε_0 . Таким образом, проникновение электрона в область острия энергетически выгодно. Это следует из выражения (11) для нижнего туннельного уровня. Именно он интересен для рассматриваемой задачи. Для нахождения верхнего туннельного уровня необходимо решить уравнение (5) при $E > \varepsilon_0$, однако здесь мы этого делать не будем.

3. Подставим (4) в уравнение (3), умножим слева на $\psi^*(\rho, \varphi)$, проинтегрируем по φ и в результате получим уравнение, которому удовлетворяет $\Phi(\rho)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\rho\Phi + E_0(\rho)\Phi + \hat{C}\Phi = E\Phi, \quad (13)$$

где Δ_ρ – радиальная часть 2D-лапласиана, $E_0(\rho)$ определяется выражением (11); а $\hat{C}$ – оператор неадиабатичности, который определяется следующим выражением:

$$\hat{C}\Phi = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_0^{2\pi} \psi^* (\Delta_\rho \psi) \Phi d\varphi + \int_0^{2\pi} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} d\varphi \right]. \quad (14)$$

В дальнейшем мы пренебрежем этим членом и укажем, при каких условиях это можно сделать.

Итак, рассмотрим уравнение

$$\Phi'' + \frac{1}{\rho}\Phi' + \left(\frac{\beta}{\rho^4} - k^2 \right) \Phi = 0, \quad (15)$$

где введены обозначения $\beta = \frac{4\hbar^4}{m^2 U^2 R^2 \varphi_0^4}$, $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \varepsilon_0)$.

Рассмотрим сначала состояния, которые соответствуют энергиям $E > \varepsilon_0$. Тогда легко показать, что в качестве фундаментальных решений уравнения (15) можно выбрать цилиндрические функции:

$$\Phi_1(\rho) = \begin{cases} J_0(k\rho) \\ Y_0(k\rho) \end{cases}, \quad k\rho \gg 1,$$

$$\Phi_2(\rho) = \begin{cases} J_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{\rho}\right) \\ Y_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{\rho}\right) \end{cases}, \quad k\rho \ll 1. \quad (16)$$

Для построения собственных значений воспользуемся граничными условиями $\psi(a) = \psi(R) = 0$, где a и R – радиальные границы системы, причем $a \ll R$:

$$\left. \begin{aligned} AJ_0(kR) + BY_0(kR) &= 0, \\ AJ_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right) + BY_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right) &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Тогда дисперсионное уравнение, определяющее энергетический спектр, приобретает вид

$$J_0(kR)Y_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right) - Y_0(kR)J_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right) = 0, \quad (18)$$

и, наконец, используя асимптотические выражения для цилиндрических функций, получим

$$E = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left(\frac{\beta^{1/2}}{a} + \pi n \right)^2. \quad (19)$$

Рассмотрим теперь состояния, соответствующие области энергий $E < \varepsilon_0$. В этом случае

$$\Phi_1(\rho) = \begin{cases} I_0(k\rho) \\ K_0(k\rho) \end{cases} \quad k\rho \gg 1, \quad (20)$$

а $\Phi_2(\rho)$ совпадает с выражением (16) ($k\rho \ll 1$).

Дисперсионное уравнение в этом случае имеет вид

$$J_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right)K_0(kR) - Y_0\left(\frac{\beta^{1/2}}{a}\right)I_0(kR) = 0, \quad (21)$$

и, переходя к асимптотам, получим

$$E = \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2}{8mR^2} \ln^2 \operatorname{ctg} \xi, \quad \xi = \frac{\beta^{1/2}}{a} - \frac{\pi}{4}, \quad \operatorname{ctg} \xi > 0. \quad (22)$$

Таким образом, существует только один уровень энергии, расположенный

ниже ε_0 , этим и обеспечивается существование основного состояния.

Отметим, что волновые функции (16) и (20) ($k\rho \ll 1$) формально соответствуют падению частицы на центр в поле $U(\rho) \sim -\rho^{-4}$, однако для энергии основного состояния мы получили конечную величину (22); причиной тому использование двух граничных условий. С математической точки зрения это обеспечивает самосопряженность оператора Шредингера в (15) [8].

Следующим вопросом, который требует обоснования, является правомерность отбрасывания члена неадиабатичности в уравнении (13). Для этого необходимо с помощью волновых функций (7) получить явный вид оператора $\hat{C}$. Мы не будем излагать здесь всю эту процедуру, но отметим лишь результат: в области $(0, \varphi_0)$ вклад в оператор $\hat{C} \sim \exp(-1/\varphi_0 \rho^2)$, т.е. экспоненциально мал и поэтому может быть отброшен. В области $(\varphi_0, 2\pi)$ $\hat{C} \sim \exp(-\hbar^2/8m\rho^2)$; таким образом, при $\rho \rightarrow 0$ электрон движется в поле эффективных потенциалов $E_0(\rho)$ и C . Условие малости $\hat{C}\Phi$ ($\hat{C}\Phi \ll E_0\Phi$) имеет вид $\rho \ll \rho_0$; именно в этом приближении решено уравнение (8) (условие $\pi\lambda \gg 1$).

В заключение отметим, что дисперсионное уравнение (8) при $\varphi_0 = 0$ переходит в следующее:

$$\tanh \pi\lambda = \frac{\alpha}{2\lambda}. \quad (23)$$

Оно определяет энергетические уровни электрона в поле изолированного линейного δ -потенциала. Решая его в приближении $\pi\lambda \gg 1$, получим выражение для ε_0 :

$$\varepsilon_0 = -\frac{mU^2R^2}{2\hbar^2}. \quad (24)$$

Авторы признательны Х.В.Неркаряну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Esaki. In Proceedings of the 17-th International Conference of the Physics of Semiconductors, San Francisco, August 1984, p.27.
2. L. Esaki. IEEE J. Quantum Electronics, QE-22, 1611 (1986).
3. Ho-Fai Cheung, Iuval Gefen, et al. Phys. Rev., 37, 11 (1988).
4. Y. Imry. Introduction to Mesoscopic Physics. Oxford, University Press, 2002.
5. Р.М.Мовсесян, А.С.Саакян. Изв. НАН Армении, Физика, 39, 147 (2004).
6. К.Зеегер. Физика полупроводников. М., Мир, 1977.
7. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1974.
8. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., Наука, 1971.

ONE-ELECTRON STATES IN A LINEAR DOUBLE δ -WELL

R.M. MOVSESYAN, A.S. SAHAKYAN

A system consisting of two linear δ -wells which form an angle φ_0 is considered. One-electron states in such a system are studied. It is shown that the tunnel coupling between the wells permits an electron to penetrate into the region of the well vertex.