УДК 538.955+538.975

В.М.Бурдейний,
В.Х.Касіяненко

ДІРАКІВСЬКИЙ «ГРЕБІНЕЦЬ» НА КОЛОВОМУ КВАНТОВОМУ НАНОКІЛЬЦЮ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Досліджується нескінченно тонке квантове нанокільце з періодично розташованими точками, в яких потенціал описується дельта функціями Дірака з рівними інтенсивностями. Одержано дисперсійне рівняння, яке детально аналізується у випадку потенціалу притягання.

Ключові слова: квантове нанокільце, дельтафункція Дірака, дисперсійне рівняння.

Abstract

The quantum circular nanoring with periodic distribution of the nodes has been investigated.The potential energy is given as Dirac's delta functions localized on nodal points. The secular equation was found and analyzed for attractive potential.

Key words: quantum nanoring, Dirac's delta function, secular equation.

Вражаючі досягнення технології, такі як рентгенівська літографія, само збірка (асамблерування), молекулярно-пучкова епітаксія, атомна силова мікроскопія створили можливості формувати квантові кільця різної геометрії з різною кількістю носіїв заряду від кількох електронів до десятків, а то сотень (мезоскпічні квантові кільця). Обширні огляди проблематики, яка пов'язана з синтезом квантових кілець, їх електрофізичних властивостей, особливостей конфайнменту, енергетичним спектром та впливу на нього електричних і магнітних полів разом із багатою бібліографією в свій час запропоновані авторами робіт[1,2].

Різноманіття форм, розмірів, технологій, задіяних у синтезі компонент як і багато інших факторів, стимулюють розробку моделей і інтенсифікують теоретичні дослідження КК, які з цілком зрозумілих мотивів фокусуються на енергетичному спектрі носіїв відповідальному за визначальні властивості КК. Важливим мотивом є також спроби одержати точні, по крайній мірі в рамках моделей , результати, а також адаптувати класичні результати фізики конденсованого стану до проблематики КК.

В одній із робіт, а саме [3], розглядається модель квантового колового кільця нескінченно малої товщини, в одній із точок якого діє потенціал, залежність якого від азимутального кута має вигляд дельта-функції Дірака. Автору вдалося отримати точні розв'язки відповідного рівняння Шедінгера, що, на думку автора відкриває перспективи застосування моделі для тлумачення даних скануючої тунельної мікроскопіїю

Дана робота є спробою узагальнити вище згадане дослідження [3]на випадок довільної кількості N періодично розташованих на КК з радіусом R центрів з дельта подібними потенціалами однакової інтенсивності Ω. Дослідження запропонованої моделі в значній мірі стимулюється феноменальними досягненнями технології атомного транспозиціювання по синтезу квантових коралів, один з яких, сформований із 48-м атомів заліза на поверхні міді, за матеріалами роботи [4] зображено на Рис.1. Періодично розташовані атоми заліза формують потенціал, який тут, звичайно лише якісно, асоціюються з дельта подібними функціями.

Рис.1. Квантовий корал із 48 атомів заліза

Квантова динаміка електронів описується рівнянням Шредінгера, яке для КК нескінченно малої товщини має наступний вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}+U(\varphi)\Psi=E\Psi \tag{1}$$

Потенціальна енергія у відповідності з прийнятою моделлю визначається співвідношенням:

$$U(\varphi)=\frac{\hbar^2\Omega}{mR^2}\sum_{n=0}^{N-1}\delta(\varphi-n\theta) \tag{2}$$

Тут $\theta=2\pi/N-$період колової решітки, повторенням якого відтворюються координати всіх центрів локалізації потенціалу. Важливою особливістю потенціальної енергії (2) є те,що вона відтворює симетрію КК щодо поворотів на кут θ. Вказана симетрія є аналогом трансляційної інваріантності ідеального кристалу, а тому дозволяє безпосередньо адаптувати до проблеми (1)-(2) теорему Блоха[5].

Прийнявши позначення:

$$l=\sqrt{2mR^2E/\hbar^2} \tag{3}$$

та врахувавши, що на кожній із дуг $\varphi\in(n\theta,(n+1)\theta)$ потенціальна енергія дорівнює нулю хвильову функцію Ψ можна записати так:

$$\Psi(\varphi)=Ae^{il\varphi}+Be^{-il\varphi} \tag{4}$$

У відповідності з теоремою Блоха

$$\Psi(\varphi+m\theta)=e^{imL\theta}\Psi(\varphi) \tag{5}$$

Застосування умови Борна-Кармана[5] в поєднанні з (5) приводить до висновку, за яким L має бути цілим числом, тобто $L=n$. Стосовно граничних умов, то для двох сусідніх дуг КК вони зводяться до співвідношень:

$$\begin{gathered}e^{iL\theta}(A+B)=Ae^{il\theta}+Be^{-il\theta}\\ e^{iL\theta}(A-B)=Ae^{il\theta}-Be^{-il\theta}-i\frac{2\Omega}{l}(Ae^{il\theta}+Be^{-il\theta})\end{gathered} \tag{6}$$

перше з яких – умова неперервності хвильової функції, а друге випливає з інтегрування рівняння Шредінгера (1) в околі вузла решітки.

Нетривіальні розв'язки системи рівнянь (6) існують при умові, що її детермінант дорівнює нулю[6]. Задовольнивши цю вимогу, можна отримати основний результат даної роботи, а саме дисперсійне рівняння колового діраківського гребінця

$$Cosn\theta=Cosl\theta+\frac{\Omega}{l}Sinl\theta \tag{7}$$

яке за своєю структурою співпадає з добре відомим результатом [7], встановленим для лінійного ланцюжка з періодичним розподілом дельта подібних потенціалів.

Для додатних значень інтенсивності потенціалу Ω висновки, які випливають із дисперсійного рівняння (7), якісно не відрізняються від тих, які мають місце для лінійного ланцюжка[7]: спектр складається із дозволених зон, розділених забороненими зонами, в границі $\Omega\to 0$ спектр стає неперервним , а при $\Omega\to\infty$ дозволені зони вироджуються в дискретні рівні. Проте у досліджуваній тут моделі при порівняно невеликій кількості вузлів ,асоційованих, наприклад з атомами квантового коралу як на Рис.1 їх−48, поняття зон стає, на відміну від лінійного кристалу з кількістю вузлів $N\sim 10^8$ на см, досить умовним, тобто спектр перестає бути скрізь щільним.

Особливим є випадок, коли інтенсивність потенціалу $\Omega<0$ і розглядаються від'ємні значення енергії, які у відповідності із формулою (4) відповідатимуть зв'язаним станами. Дійсно, для $E<0$ параметр l, який відіграє роль орбітального квантового числа і визначається формулою (3), стає уявним, то хвильові функції матимуть експоненційну поведінку і будуть в основному локалізованими в околах особливих точок потенціалу. Після переходу до нових змінних

$$\kappa=\sqrt{2m|E|R^2/\hbar^2}\ \ ;\ \ w=-\Omega\theta>0\ \ ;\ \ x=\kappa\theta \tag{8}$$

дисперсійне рівняння набуває такого вигляду:

$$Cosn\theta = Chx - \frac{w}{x}Shx \tag{9}$$

Розв'язавши рівняння (9), що вимагає застосування числових методів,при заданих Ω, n і θ можна знайти x і за відповідною формулою (8) встановити енергію зв'язаного стану.

Тим не менше, з рівняння (9) випливають висновки загального характеру. Оскільки ліва частина рівняння (9) за модулем не перевищує одиниці, то розв'язки існують при певних обмеженнях на можливі значення перенормованої інтенсивності потенціалу w. Перш за все слід зауважити, що права частина рівняння (9), тобто

$$y(x) = Chx - \frac{w}{x}Shx \tag{10}$$

при $x = 0$ дорівнює $y(0) = 1 - w < 0$, причому $y(x)$ є зростаючою функцією. Це означає, що дисперсійне рівняння завжди має розв'язки, проте, при обмежених значеннях $Cosn\theta$, і при цих значеннях діраківський «гребінець» здатний локалізувати частику у вузлах решітки. З графіків Рис.2 випливає, що при $w = 0.5$ розв'язки існують, якщо $n\theta > \pi / 3 + 2\pi m$, при $w = 1.5$, якщо $n\theta > 2\pi / 3 + 2\pi m$. Коли $w \geq 2$, власні значення дисперсійного рівняння існують для всіх значень $Cosn\theta$.

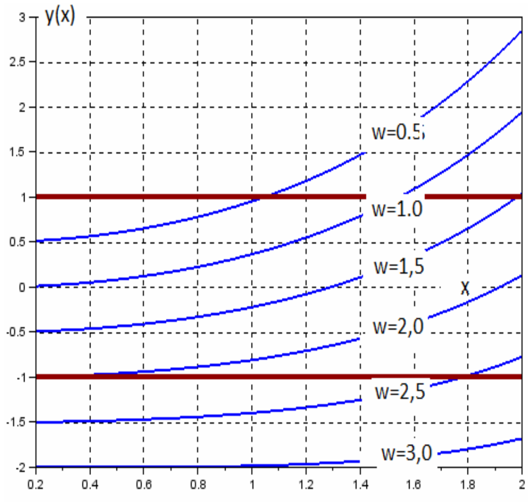

Рис.2 Графіки функції $y(x)$ при різних значеннях інтенсивності w

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1.Viefers S. Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents/ S.Viefers, P.Koskinen, P.Singha Deo, Manninn// Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.−2004.−Vol.21, no.1.− P.1-45.

2.Fiete Gregory A.Theory of Quantum Corrals and Quantum Mirages/ Gregory A. Fiete, Eric J. Heller//Rev.Mod.Phys.−2003.−Vl.75.−P.933

3.Raphael J. The quantum mechanical problem of a particle on a ring with delta well/ J.Raphael, F.Berger// arXiv:2211.16149v1 [quant-ph] 29 Nov 2022

4.Crommie M.F.Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface / M.F.Crommie, C.P.Lutz and D.M.Eigler // .−Science.−1993.−Vol.262, no.5131. –P. 218220.

5.Ashcroft Neil W. Solid State Physics/ Neil W. Ashcroft, N.David Mermin.− New York: Holt,Rinehart and Winston, 1976.−826

6.Вакарчук І.О. Квантова механіка: підручник/І.О. Вакарчук.−Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2012 .− 872с.

7.Flügge Siegfried Practical Quantum Mechanics I/ Siegfried Flügge.−Berlin−Heidelberg –New York: Springer-Verlag, 1971.−340 p.

Бурдейний Володимир Мефодійович,*кандидат фізико-математичних наук,доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.* brdnvldmr@ukr.net

Касіяненко Василь Харитонович, *доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.*

Burdeynyy Volodymyr Mefodiyovych, *PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia , brdnvldmr@ukr.net*

Kassiyanenko Vasul Kharutonovuch*, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, professor, Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia .*