

ВПЛИВ МАГНІТНОГО ПОЛЯ НА СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ У КОЛОВОМУ ДІРАКІВСЬКОМУ «НАНО ГРЕБІНЦІ»

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Досліджується вплив однорідного магнітного поля на енергетичний спектр нескінченно тонкого квантового нанокільця з періодично розташованими вузлами, в кожному з яких зосереджено дельта подібний потенціал з рівними для всіх вузлів інтенсивностями. Магнітне поле описується в термінах магнітного потоку захопленого кільцем. Одержано і аналізується дисперсійне рівняння, в яке відносний магнітний потік входить в адитивній формі разом з квазі хвильовим числом, що пробігає першу зону Бріллюєна. Для кількох значень інтенсивності потенціалу побудовані графіки залежності хвильового числа від відносного магнітного потоку.

Ключові слова: квантове нанокільце, дельта функція, магнітний потік, дисперсійне рівняння.

Abstract

Impact of the uniform magnetic field on the energetic spectrum of the quantum circular nanoring has been investigated. The nanoring consists of some number of nodes with their periodic distribution along the circle. The delta function's type potential with the same intensity in each of nodes is localized in every of them. The magnetic field has been described in terms of the magnetic flux which passes through the ring. The main result of the work reduces to the secular equation receiving and its solutions analyzing.

Key words: quantum nanoring, delta function, magnetic flux, secular equation.

Сучасні технології досягли настільки високого рівня, що стало можливим маніпулювання окремими атомами, позиціонуючи їх в наперед заданих точках попередньо створених підкладок, забезпечуючи відтворення розмірів, форми та топології таких штучно синтезованих об'єктів. Як правило, в силу специфічності їх фізичних властивостей, особливий інтерес викликає синтез і дослідження систем нано-та мезоскопічних розмірів в тому числі, так званих, квантових кілець (КК), описаних в обширній науковій бібліографії, яка представлена в роботах [1-4], хоча список цитованих там робіт зі зрозумілих причин далеко не вичерпаний.

В більшості робіт, які стосуються КК базовими є або наближення сильного зв'язку, або наближення квазі-вільних електронів. В останньому випадку припускається, що електрони рухаються вільно вздовж кільця, перебуваючи лише під дією поля конфайнменту. Проте, з'являються дослідження, в яких на поле конфайнменту накладається додатковий потенціал, який порушує гладкість кільця. У цьому контексті відзначається робота [3], в якій в якості такого збурення розглядається потенціал, який описується зосередженою в одній точці дельта-функцією Дірака. Як показано автором у запропонованій ним моделі КК рівняння Шредінгера може бути точно розв'язано, а одержані результати, на думку автора, можуть стати в нагоді при інтерпретації даних скануючої тунельної мікроскопії.

Продемонстрована в роботі [3] можливість одержання точних результатів щодо спектру носіїв у КК при дії локалізованого в одній точці дельта подібного потенціалу сприяла появі узагальнення моделі, представленого авторами роботи [5], в якій досліджується спектр колового діраківського нанокільця радіусу R з періодично розподіленими на ньому N точкових центрів з дельта подібними потенціалами однакової інтенсивності Ω . Одержане авторами секулярне рівняння за формою співпадає з добре і давно відомими результатами встановленими для так званого лінійного діраківського ланцюжка [6].

Загально відомо, що спектр наносистеми, якою є квантове кільце, а також її електрофізичні властивості суттєво чутливі до дії зовнішніх чинників, зокрема магнітного поля. Саме тому певний інтерес викликає запропоноване тут дослідження впливу магнітного поля на спектр описаного раніше колового діраківського нанокільця. Має зміст зауважити, що одержані результати

допускають застосування для тлумачення ефекту Ааронова-Бома, персистентного струму і, окрім цього, цікаві тим, що стосовно рівняння на власні значення, мають точний характер.

Отже, нехай квантове кільце пронизується магнітним потоком Φ . Інтегруючи векторний потенціал вздовж контуру кільця можна одержати

$$\oint \vec{A} d\vec{l} = \Phi \quad (1)$$

де $\vec{A}$ – векторний потенціал однорідного магнітного поля перпендикулярного до площини кільця. В силу осової симетрії векторний потенціал в усіх точках дотичний до контуру і не залежить від азимутального куту. З врахуванням цього після інтегрування зі співвідношення (1) для векторного потенціалу впливає наступний вираз:

$$A = \frac{\Phi}{2\pi R} \quad (2)$$

При наявності магнітного поля оператор імпульсу містить векторний потенціал, з врахуванням якого хвильове рівняння має бути записане так

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \Psi + U(\varphi) \Psi = E \Psi \quad (3)$$

Тут $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e}$ – квант магнітного потоку, а $U(\varphi)$ – періодичний потенціал виражений співвідношенням:

$$U(\varphi) = \frac{\hbar^2 \Omega}{m_0 R^2} \sum_{n=0}^{N-1} \delta(\varphi - n\theta) \quad (4)$$

де $\theta = 2\pi/N$ – період колової решітки, повторенням якого відтворюються координати всіх центрів локалізації потенціалу.

Поклавши $k^2 = 2m_0 E R^2 / \hbar^2$, хвильове рівняння можна привести до такого вигляду:

$$\partial_\varphi^2 \Psi - 2i \frac{\Phi}{\Phi_0} \partial_\varphi \Psi + \left[k^2 - \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 - 2m_0 R^2 U(\varphi) / \hbar^2 \right] \Psi = 0 \quad (5)$$

На будь-якому відрізку $((n-1)\theta, n\theta)$ потенціальна енергія дорівнює нулю, а тому хвильова функція як комбінація фундаментальних розв'язків, записується так:

$$\Psi(\varphi) = A e^{ip_1 \varphi} + B e^{ip_2 \varphi} \quad (6)$$

причому характеристичні параметри p_i виражаються рівностями:

$$p_1 = k + q, \quad p_2 = -k + q, \quad (7)$$

в яких $q = \Phi / \Phi_0$ – відносний магнітний потік.

В силу періодичності системи хвильова функція має задовольняти теоремі Блоха[7], тобто

$$\Psi(\varphi + \theta) = e^{iK\theta} \Psi(\varphi) \quad (8)$$

Стосовно параметру K , який відіграє роль хвильового числа, то у відповідності із краєвою умовою Борна-Кармана[7], завдяки якій замикається кільце, він пробігає N цілочисельних значень із першої зони Бріллюєна, так, що має місце співвідношення:

$$K \in (-N/2, -N/2 - 1, -N/2 - 2, \dots, N/2 - 1, N/2] \quad (9)$$

В околі вузла решітки з $\varphi_n = n\theta$ хвильова функція повинна бути неперервною

$$A e^{ip_1 n\theta} + B e^{ip_2 n\theta} = e^{iK\theta} [A e^{ip_1 (n-1)\theta} + B e^{ip_2 (n-1)\theta}] \quad (10)$$

Друга краєва умова впливає з інтегрування хвильового рівняння в околі виділеного вузла, що дає:

$$e^{iK\theta}[Aip_1e^{ip_1(n-1)\theta} + ip_2Be^{ip_2(n-1)\theta}] - (ip_1Ae^{ip_1n\theta} + ip_2Be^{ip_2n\theta}) - 2\Omega[Ae^{ip_1n\theta} + Be^{ip_2n\theta}] = 0 \quad (11)$$

Дисперсійне рівняння одержується з рівності нулю детермінанта цієї системи рівнянь

$$\begin{vmatrix} e^{iK\theta} - e^{ip_1\theta} & e^{iK\theta} - e^{ip_2\theta} \\ ip_1(e^{ip_1\theta} - e^{iK\theta}) + 2\Omega e^{ip_1\theta} & ip_2(e^{ip_2\theta} - e^{iK\theta}) + 2\Omega e^{ip_2\theta} \end{vmatrix} = 0 \quad (12)$$

Обчислення визначника і відділенням дійсної та уявної частин дає наступні співвідношення:

$$\cos(K+q)\theta \left[\cos(K-q)\theta - \left(\cos k\theta + \frac{\Omega}{k} \sin k\theta \right) \right] = 0 \quad (13)$$

$$\sin(K+q)\theta \left[\cos(K-q)\theta - \left(\cos k\theta + \frac{\Omega}{k} \sin k\theta \right) \right] = 0 \quad (14)$$

Таким чином дисперсійне рівняння має таку остаточну форму:

$$\cos(m - \Phi / \Phi_0)\theta - \left(\cos k\theta + \frac{\Omega}{k} \sin k\theta \right) = 0 \quad (15)$$

яка у відсутності магнітного поля співпадає із одержаним раніше[5], результатом для випадку ідеального колового Діраківського гребінця.

Дисперсійне рівняння має структуру добре відому із квантової теорії модельних конденсованих систем і його аналіз у випадку відсутності магнітного поля та прямолінійної геометрії в деталях описаний у роботі [6]. Спектр у відсутності поля складається з окремих енергетичних зон. Кожна зона складається із енергетичних рівнів, які у випадку достатньо великої кількості вузлів пробігають квазінеперервну сукупність значень із першої зони Бріллюєна. При невеликих значеннях кількості вузлів, як, наприклад у квантовому коралі[2], де їх кількість дорівнює 48, поняття зон зі щільним спектром втрачає свій зміст, а, швидше за все, така група рівнів може бути аналогом електронних під оболонок, тоді, як енергетична зона асоціюється з електронними оболонками атома.

У відсутності магнітного поля загальний розв'язок

$E_j(m)$ рівняння (15) можна класифікувати набором із

квантових чисел j і m , перше з яких нумерує енергетичні зони або оболонки (при обмеженій десятками кількості вузлів), а друге з вищевказаними у співвідношенні (10) значеннями, є «квазі-хвильовим»

числом. Як і в моделі гладкого кільця рівняння (15) симетричне щодо заміни m на $-m$, що свідчить про двократне виродження спектру з відповідними наслідками щодо персистентного струму.

Якщо спектр, тобто $E_j(m)$, вважати відомим, то вплив магнітного поля, як впливає з рівняння (15), зводиться до зсуву значення m на величину відносного магнітного потоку, тобто закон дисперсії в магнітному полі виражається функцією $E_j(m - \Phi / \Phi_0)$ причому роль хвильового числа відіграє $(m - \Phi / \Phi_0)\theta$. Заміна m на $-m$ у відповідності з рівнянням (15) приводить до зміни енергії, яка стає рівною $E_j(m + \Phi / \Phi_0)$, Це свідчить про те, що, як і у випадку гладкого КК, магнітне поле знімає двократне виродження енергетичного спектру електронів. який, тим не менше, залишається інваріантністю щодо перетворення симетрії $m \rightarrow -m$, $\Phi \rightarrow -\Phi$. Має зміст також відзначити особливість енергетичного спектру, яка немає аналогії у випадку

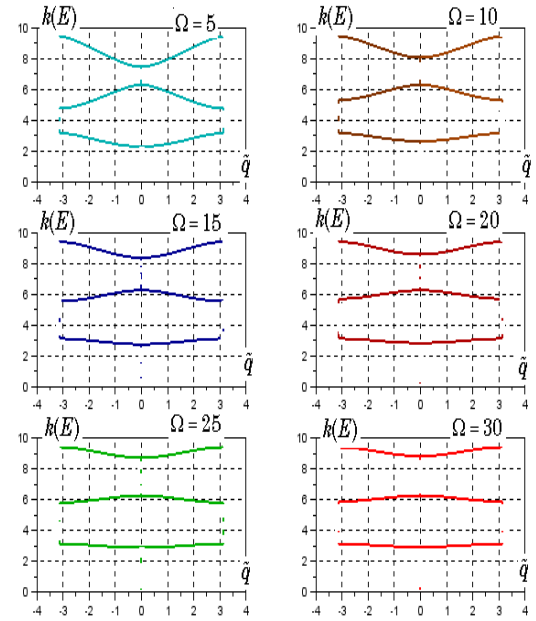


Рис.1. Пояснення див. у тексті

гладкого кільця, а саме періодична залежність енергії від магнітного потоку. Дійсно, з дисперсійного рівняння (15) випливає, що таким періодом є магнітний потік, виражений співвідношенням $\Phi_p = 2\pi\Phi_0 / \theta$.

Наближені розв'язки дисперсійного рівняння можна знати лише для високоекситованих станів, для яких $\left(\Omega\hbar / R\sqrt{2m_0E}\right) \ll 1$. Уявлення про поведінку точних розв'язків графіки Рис.1, на яких подано хвильове число, визначене формулою $k(E) = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2m_0E}$, в залежності від відносного магнітного потоку $\tilde{\varphi} = (\Phi / \Phi_0)\theta$ для кількох значень інтенсивності потенціалу в точці, яка відповідає центру зони Бріллюєна, тобто при $m = 0$.

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. Бурдейний В.М. Діраківський «гребінець» на коловому квантовому нанокільці/ В.М.Бурдейний, В.Х.Касіяненко// Матеріали Літнауково-технічної конференції підрозділів ВНТУ, Вінниця 20-22 березня 2024 р. . –Електр. текст. дані URI: <https://conferences.vntu.edu.ua/index.php/all-feeem/all-feeem/2024/paper/view/20555>
6. Flügge Siegfried Practical Quantum Mechanics I /Siegfried Flügge. –Berlin–Heidelberg –New York: Springer-Verlag, 1971. –340 p.
6. Ashcroft Neil W. Solid State Physics/ Neil W. Ashcroft, N.David Mermin. – New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976. –826

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.

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

Kassiyenko Vasul Kharutonovych, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, professor, Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia.