ПОЛНЫЙ СПЕКТР СОСТОЯНИЙ ОГРАНИЧЕННОЙ СИСТЕМЫ КВАНТОВЫХ ЯМ

Е.Я.Глушко

Предложено точное решение задачи конечной периодической системы N плоских потенциальных ям, разделенных тонкими барьерами переменной толщины. Анализируются общие условия отщепления от зон поверхностных уровней. Модифицированное условие Кронига–Пенни для зон, включающих в себя $N-2$ состояния, дается формулой Муавра. Рассчитана полная картина зонных и локальных уровней для различных случаев.

1. Известная с 30-х годов задача о бесконечной периодической системе плоских ям принадлежит к числу точно решаемых моделей [1]. Ограниченные или полуограниченные системы до сих пор рассматривались в рамках различного рода приближений. Для модели твердого тела как системы плоских атомных потенциалов — это прежде всего приближение трансляционной инвариантности; в периодических квантовых размерных структурах — приближение независимых зон, приближение эффективной частицы. Точное решение полной задачи, когда рассматривается совокупность всех состояний физической системы, может служить отправной точкой в анализе границ применимости многих распространенных подходов в физике поверхности и квантовых размерных структур. Представляет интерес также возможность аналитического расчета механических, термодинамических, оптических и других свойств модели.

2. Рассмотрим N одномерных плоских потенциальных ям шириной a, разделенных бесконечно тонкими барьерами с коэффициентами непроницаемости $\Omega(E)$, зависящими от энергии E. Гамильтониан такой модели имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{m}\left(-\frac{\Delta}{2} + \Omega(E)\sum_{n=1}^{N-1}\delta(x-na)\right). \qquad (1)$$

В несимметричном случае левый и правый барьеры всей пленки равны U_0, U_1 соответственно; полагаем $U_1 > U_0$. Второе слагаемое в (1) с $\Omega = \Omega(E)$ представляет собой предельный переход для некоторого непрямоугольного барьера, когда его размеры стремятся к нулю.

Стандартная процедура решения системы граничных условий без использования приближения трансляционной инвариантности для предэкспоненциальных множителей приводит к детерминанту произведения матриц

$$\mathrm{Det} = 2i\hat{S}_0^+, \hat{S}_n, \qquad \hat{S}_0^+ = (\lambda_0, -\nu_0), \qquad \hat{S}_n^+ = \left(D_n^1, D_n^2\right),$$

$$\lambda_0 = k(\Omega + k)\cos ka + \left(\Omega k_0 - k^2\right)\sin ka, \qquad \nu_0 = k_0 \sin ka + k\cos ka,$$

$$k = (2mE)^{1/2}/\hbar, \qquad k_0 = \left(2m(U_0 - E)\right)^{1/2}/\hbar.$$

Индекс «+» обозначает операцию эрмитового сопряжения. Для матрицы-столбца $\hat{S}_n$ справедливо рекуррентное соотношение

$$\hat{S}_n = \hat{\Lambda}\hat{S}_{n-1}, \qquad \hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mu & \nu \\ \lambda & \mu \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$\lambda = \left(\Omega^2 - k^2\right)\sin ka + 2\Omega k\cos ka, \qquad \nu = \sin ka, \qquad \mu = -\Omega\sin ka - k\cos ka.$$

После развертывания рекуррентного соотношения имеем

$$\mathrm{Det} = (2i)^N \hat{S}_0^+ \hat{\Lambda}^{N-2} \begin{pmatrix} D_1^1 \\ D_2^1 \end{pmatrix},$$

где параметры правой границы $D_1^1 = -\nu_1$, $D_1^2 = \lambda_1$ определяются так же, как и записанные выше для левой границы ν_0, λ_0 с соответствующей заменой индекса $0 \to 1$, $U_0 \to U_1$.

Благодаря равенству диагональных элементов в $\hat{\Lambda}$ степени $\hat{\Lambda}^m$ выражаются через четные и нечетные слагаемые биномиальных разложений

$$\hat{\Lambda}^m = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \left(\mu+\sqrt{\lambda\nu}\right)^m + \left(\mu-\sqrt{\lambda\nu}\right)^m, & \sqrt{\frac{\nu}{\lambda}}\left(\left(\mu+\sqrt{\lambda\nu}\right)^m - \left(\mu-\sqrt{\lambda\nu}\right)^m\right) \\ \left(\left(\mu+\sqrt{\lambda\nu}\right)^m - \left(\mu-\sqrt{\lambda\nu}\right)^m\right)\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}}, & \left(\mu+\sqrt{\lambda\nu}\right)^m + \left(\mu-\sqrt{\lambda\nu}\right)^m \end{bmatrix}, \tag{2}$$

что позволяет записать детерминант в компактном виде. Приравнивая Det нулю с учетом (2), имеем уравнение для спектра состояний

$$\frac{\left(\mu + \sqrt{\lambda\nu}\right)^m}{\left(\mu - \sqrt{\lambda\nu}\right)^m} = \frac{\left(\lambda_0\sqrt{\nu} + \nu_0\sqrt{\lambda}\right)\left(\lambda_1\sqrt{\nu} + \nu_1\sqrt{\lambda}\right)}{\left(\lambda_0\sqrt{\nu} - \nu_0\sqrt{\lambda}\right)\left(\lambda_1\sqrt{\nu} - \nu_1\sqrt{\lambda}\right)}. \tag{3}$$

Здесь и ниже $m = N - 2$. Характер энергетического спектра определяется знаком произведения $\lambda\nu$. В области $\lambda\nu > 0$ существуют генерируемые поверхностью изолированные или локальные уровни. Если число потенциальных ям велико $m \gg 1$, то решение трансцендентного уравнения (3) для $\lambda\nu > 0$ упрощается. В пределе $N \to \infty$ корни совпадают с нулями или полюсами правой части (3) в зависимости от знака μ

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} = \mathrm{sign}(\mu)\frac{\lambda_i}{\nu_i}, \qquad i = 0, 1, \tag{4}$$

Для конечных N условие применимости (4) отвечает достаточной удаленности локальных состояний от дна либо потолка зоны. С учетом тождества $\mu^2 = k^2 + \lambda\nu$ имеем $\sqrt{\lambda\nu} \gg |\mu|/2m$.

В области значений энергии $\lambda\nu < 0$ скобки в правой и левой частях (3) становятся комплексными и спектр определяется формулой Муавра для корней порядка m из правой части (3)

$$\varphi(s) = \frac{2\pi s + \varphi_1 + \varphi_0}{m}, \qquad s = 1 \dots m. \tag{5}$$

Здесь

$$\varphi_i = \operatorname{arctg}\left(\sqrt{\frac{-\lambda}{\nu}\frac{\nu_i}{\lambda_i}}\right).$$

С учетом явного вида параметров λ, ν, λ_i, ν_i можно показать, что соотношение (5) переходит в обобщенное уравнение Кронига–Пенни для зонных уровней ограниченной системы потенциалов

$$\cos\frac{2\pi s + \varphi_1 + \varphi_0}{m} = \cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka. \tag{6}$$

Влияние границ φ_1, φ_0 для $m \gg 1$, как это видно из (6), сказывается лишь на состояниях s вблизи дна или потолка зон. Здесь $k = k(s)$, $\Omega = \Omega(k)$. Роль трансляционного волнового вектора играет величина $2\pi s/m$. Следует отметить, что зоны формируются $N-2$ состояниями; недостающая пара состояний определяется решениями (4). Будем иметь в виду также, что рассмотренная процедура решения задачи на собственные значения допускает зависимость параметров a, Ω от энергии E.

Предельные переходы $\Omega \to \infty$, $\Omega \to 0$ в (4) и (6) дают известные наборы решений для изолированных потенциальных ям шириной a в первом случае и спектр в яме шириной Na во втором случае.

Решение уравнений (4), (6) для конкретного значения Ω в области $E < U_0$ дает систему чередующихся разрешенных и запрещенных зон с объемными и поверхностными локальными состояниями в запрещенных зонах. Совокупность таких результатов для различных Ω, принадлежащих некоторой области, дает $E\Omega$-диаграмму состояний (рис. 1). Граничные потенциалы при этом фиксированы. $E\Omega$-диаграмма позволяет наглядно представить энергетический спектр систем с переменной проницаемостью внутренних барьеров $\Omega(E)$. Специфика плоских потенциалов здесь проявляется в соотношении для потолка зон $k_l = \pi l/a$(нули ν), дно зон задается нулями λ.

3. Необходимое условие отщепления поверхностных состояний легко получить из (4), если учесть соотношения для параметров

$$\mu \simeq \sin(ka + \alpha_\mu), \qquad \lambda \simeq \sin(ka + 2\alpha_\mu), \qquad \nu_i \simeq \sin(ka + \alpha_{\nu_i}),$$

$$\lambda_i \simeq \sin(ka + \alpha_{\nu_i} + \alpha_\mu), \qquad \alpha_\mu = \operatorname{arctg} k/\Omega, \qquad \alpha_{\nu_i} = \operatorname{arctg} k/k_i,$$

$$k_i^2 = g_i^2 - \Omega^2, \qquad g_i^2 = \frac{2mU_i}{\hbar^2}. \tag{7}$$

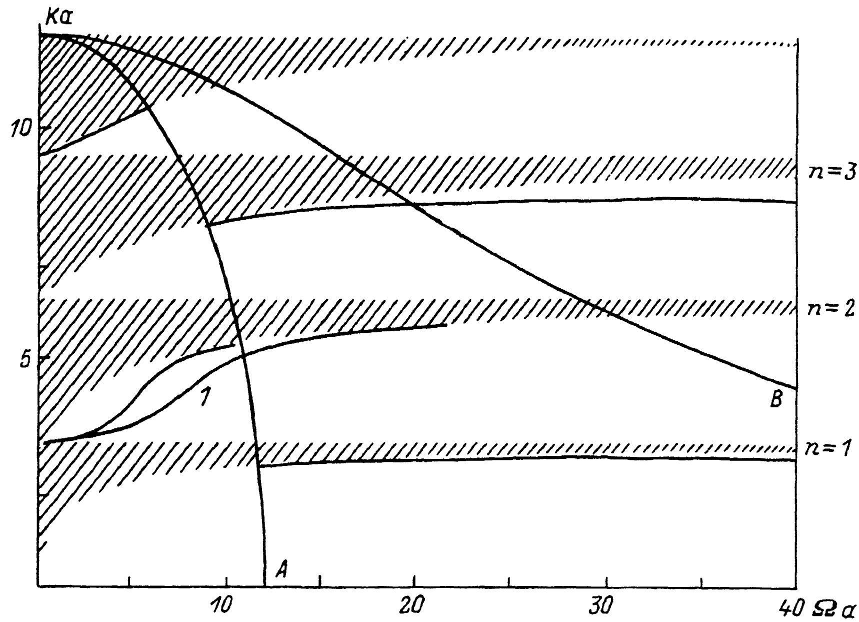

Рис. 1. Диаграмма энергетического спектра симметричной системы плоских потенциальных ям для $ga = 12$.

Разрешенные зоны энергий $n = 1, 2, 3, 4$ заштрихованы. Кривая *1* — локальный уровень $\bar{\Omega} a = 25$ в запрещенной зоне $n = 2$. Для остальных зон локальные уровни не приведены. Поверхностные уровни — сплошные необозначенные линии.

В области $k(\Omega) > k_i(\Omega)$, отвечающей случаю, когда эффективная высота межъямных барьеров меньше высоты граничной стенки U_i, поверхностные уровни отщепляются от потолка зон при малых Ω и при $\Omega \to k_i$ приближаются к дну последующих зон. Если эффективные межъямные барьеры ниже U_i, то поверхностные состояния отщепляются от дна зон. В общем случае, когда $U_0 \not\equiv U_1$, для поверхностных состояний существуют три области на $E\Omega$-диаграмме.

a) $k > k_1(\Omega)$. Поверхностные состояния отщепляются от дна зон. С ростом Ω величина отщепления в этой области возрастает.

b) $k < k_0(\Omega)$. Поверхностные состояния отщепляются от потолка зон.

c) $k_1(\Omega) > k > k_0(\Omega)$. Поверхностные состояния вблизи барьера U_1 находятся у потолка зон, тогда как состояния, генерируемые поверхностью U_0, отщепляются от дна зон.

Как следует из (4), (7), достаточное условие существования поверхностных состояний заключается в том, что состояния в окрестности дна зоны возникают при $\operatorname{sign}(\mu) = 1$, а п. b) регулируется условием $\operatorname{sign}(\mu) = -1$.

На рис. 1 приведена $E\Omega$-диаграмма симметричной системы плоских потенциальных ям $U_0 = U_1$. В этом случае промежуточная область (c) отсутствует, поверхностные уровни двукратно вырождены. Линия $Ka{-}A$ описывается уравнением $k = k_0(\Omega)$, она разделяет две области плоскости $E\Omega$ с различным характером отщепления поверхностных состояний. Если непроницаемости внутренних барьеров $\Omega = \text{const}$,

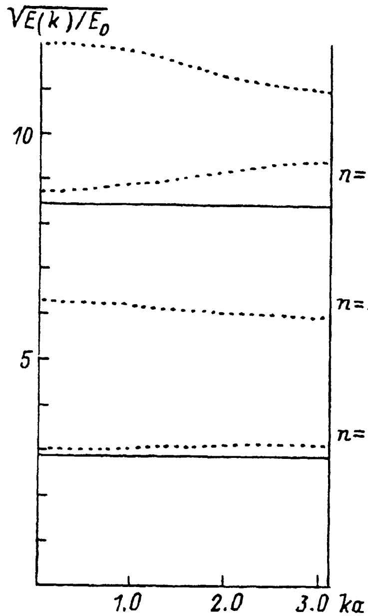

Рис. 2. Дисперсия энергии частицы в системе плоских потенциальных ям. $ga = 12$, $E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

Сплошные линии — поверхностные уровни вблизи зон $n = 1, 3$; точки — зависимость от волнового числа.

то картина состояний дается соответсвующим вертикальным сечением $E\Omega$-диаграммы. В более сложных ситуациях следует учитывать зависимость $\Omega(E)$ и пользоваться рис. 1 как номограммой. Система плоских потенциальных ям с тонкими стенками переменной толщины, когда непроницаемость барьеров с ростом энергии уменьшается по закону

$$k = g/\left(1 + \Omega^2/\Omega_0^2\right),$$

где $\Omega_0 a = 30$, дается кривой $Ka{-}B$. Выбранная для иллюстрации модель отражает характерную ситуацию: с приближением E к энергии межъямных барьеров их проницаемость возрастает.

На рис. 2 приведена картина спектра для случая $Ka{-}B$. Дисперсия энергии частицы в зонах рассчитывалась по формуле (6).

4. Обобщение полученных результатов на двумерный и трехмерный случаи не представляет труда ввиду аддитивности потенциала в рассматриваемой модели. В частности, полный спектр для направлений вдоль осей симметрии системы определяется $E\Omega$-диаграммой с учетом различия постоянных решетки.

Если одна из стенок бесконечно высока, то соответствующий поверхностный уровень выталкивается в зону, $\lambda_i\sqrt{\nu} - \nu_i\sqrt{\lambda} \to \mu + \sqrt{\lambda\nu}$ и показатель степени в левой части (3) возрастает на 1. В потенциальном ящике с U_0, $U_1 \to \infty$ отщепленных уровней нет, а зона описывается стандартной формулой Кронига–Пенни, для чего в (6) надо положить $\varphi_1 = \varphi_0 = 0$, $m \to N$, с трансляционным волновым числом $k = 2\pi s/Na$.

Произвольное локальное возмущение периодического потенциала (непроницаемость стенки с номером $\bar{m}$ $\Omega \to \bar{\Omega}$) решается двукратным применением найденного рекуррентного соотношения. Здесь мы приводим результат для наиболее простого случая объемного локального потенциала $\bar{m}$, $N - \bar{m} \gg 1$. Зонные состояния испытывают слабое возмущение, однако один из уровней «выталкивается» в запрещенную область так, что каждая зона содержит теперь $N-3$ состояния. Так же как и для поверхностного, существование объемного локального уровня зависит от Ω, а его положение определяется соотношением

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} = \mathrm{sign}(\mu)\frac{\bar{\Omega}-\Omega}{2}. \tag{8}$$

В соответствии с известным результатом для изолированной зоны при $\bar{\Omega} > \Omega$ объемный локальный уровень отщепляется от потолка, в противном случае — от дна зоны. Расчет по (8) в рассматриваемой полной задаче дает несколько более сложное поведение локального состояния. Кривая *1* на рис. 1 отвечает объемному локальному уровню для $\bar{\Omega}a = 25$.

В рамках теории возмущений включение слабых дополнительных взаимодействий, например сил изображения, в общем случае приводит к сдвигу и расщеплению поверхностных уровней. Влияние плавного локального возмущения на зонные состояния удобно анализировать в терминах пакетных состояний [2]. Как известно, оно приводит к появлению координатной зависимости дна (потолка) зон. Отсюда следует вывод о неадекватности приближения эффективной частицы в теории квантовых размерных структур, когда затравочная частица в периодическом потенциале со слабым локальным возмущением подменяется эффективной частицей в локальном потенциале [3].

Очевидная несправедливость приближения трансляционной инвариантности поверхностных состояний следует из сравнения условия Тамма [4] (локальные состояния в полубесконечной среде возникают во всех запрещенных зонах, за исключением, может быть, низшей) с полученным в настоящей работе точным результатом. Для зонных состояний нарушение трансляционной инвариантности, определяемое фазами φ_0, φ_1 в (6), в меру величины m существенно лишь вблизи краев зон.

Список литературы

[1] Kronig R.L., Penney W. // Proc. Roy. Soc. 1931. V. 130. P. 499.
[2] Глушко Е.Я. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 11. С. 3143; 1993. Т. 35. № 8. С. 2202.
[3] Силин А.П. // УФН. 1985. Т. 147. № 3. С. 485.
[4] Тамм И.Е. // ЖЭТФ. 1933. Т. 3. С. 34; Лифшиц И.М., Пекар С.И. // УФН. 1955. Т. 56. № 4. С. 531.

Криворожский педагогический институт

Поступило в Редакцию
6 декабря 1993 г.
В окончательной редакции
15 февраля 1994 г.