01

# Асимптотика нижней границы непрерывного спектра для квантовых слоев, связанных через периодические системы малых отверстий

© И.Ю. Попов

Институт точной механики и оптики (технический университет), С.-Петербург

*Поступило в Редакцию 24 апреля 2001 г.*

Для квантовых слоев, соединенных цепочкой или двумерной решеткой малых отверстий, найдена асимптотика нижней границы непрерывного спектра.

Развитие наноэлектроники привело к созданию нового класса объектов: квантовых точек, волноводов и слоев, с использованием которых могут быть созданы принципиально новые устройства (см., например, [1]). Для описания их функционирования необходимо изучение транспортных свойств электрона в данных структурах, что, в свою очередь, связано с исследованием спектральных свойств соответствующего квантово-механического оператора. В последнее время большое внимание уделяется изучению связанных квантовых слоев [2], которые рассматриваются как мезоскопические системы, т. е. столь малые, что необходимо описывать электрон с квантовой точки зрения, но столь большие, что его движение можно рассматривать в усредненном поле, не выделяя отдельные атомы. Данная работа посвящена исследованию спектральных свойств квантовых слоев $\Omega_\pm = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbf{R}^2 \times [0, \pm d_\pm]\}$, соединенных через периодические системы малых отверстий. Случай одного отверстия $\omega_a$ диаметром $2a$, $\omega_a = a\omega$ был рассмотрен в [3], где было показано, что у оператора Лапласа с условием Дирихле существует связанное состояние $\lambda_a$, близкое к границе непрерывного спектра, причем для него были получены оценки

$$e^{-c_1 a^{-3}} \leqslant \frac{\pi^2}{d_+^2} - \lambda_a \leqslant e^{-c_2 a^{-3}} \tag{1}$$

для достаточно малых $a, d_+ \geqslant d_-$. Здесь $c_1, c_2$ — некоторые константы.

В настоящей работе мы рассматриваем случаи периодической цепочки и периодической решетки отверстий. Используется метод согласования асимптотических разложений решений краевых задач [4,5]. Вариант этого метода для собственных значений, близких к границе непрерывного спектра, разработан в [6–10].

Рассмотрим случай, когда отверстия образуют периодическую цепочку. Пусть $\Lambda_1$, $\Lambda_1 = \{x, x = (qL, 0, 0), q \in Z\}$ — соответствующая решетка Браве, а элементарная ячейка содержит только один центр отверстия ($\omega_i^a = a\omega_i, \omega_{0,i} = \omega_i$). Из-за периодичности соответствующее решение $\psi_a$ удовлетворяет условию Блоха: $\psi_a(x + L) = e^{i\theta L}\psi_a(x)$, где $\theta$ — квазиимпульс ($-\pi L^{-1} \leqslant \theta \leqslant \pi L^{-1}$). При фиксированном значении квазиимпульса мы имеем собственное значение $\lambda_a^\theta$, асимптотику которого мы находим, а затем, меняя $\theta$, получаем параметры зоны. Асимптотическое разложение мы ищем для некоторой функции $f_{\Lambda_1}$ от $\lambda_a^\theta = k_{a,\theta}^2$:

$$f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) = L\sqrt{\pi^2 - k_{a,\theta}^2 d_+^2 + \theta^2 d_+^2} = k_3^\theta a^3 + o(a^3). \tag{2}$$

Асимптотическое разложение для соответствующей собственной функции таково:

$$\psi_a(x) = \pm f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta}) \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{q=-\infty}^{\infty} a^j \left(P_{p+1}^{q,j}(D_y) G^\pm(x, y, k_{a,\theta})\right)\Big|_{y=z^q},$$

$$x \in \Omega^\pm \backslash U_q S_{a^{1/2}}^q, \tag{3}$$

$$\psi_a(x) = \sum_{j=1}^{\infty} v_j^q(x/a) a^j, \quad x \in S_{2a^{1/2}}^q, \tag{4}$$

где $P_1^{q,j}(D_y) = \alpha_q^j \frac{\partial}{\partial n_y}$ (условие Блоха приводит к соотношению: $\alpha_q^j = e^{i\theta Lq}\alpha_0^j$). Здесь $G^\pm(x, y, k_{a,\theta})$ — функция Грина для слоя $\Omega^\pm$. Используя процедуру согласования асимптотических разложений, получаем асимптотику границ зоны. Оказывается, что при достаточно малых $a$ нет лакуны, а для нижней границы непрерывного спектра лапласиана Дирихле получается следующая асимптотика:

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \dfrac{\pi^2}{d_+^2} - \dfrac{\pi^6}{d_+^6 L^2} b_{\omega_0}^2 a^6 + o(a^6), & d_+ > d_-, \\[2ex] \dfrac{\pi^2}{d^2} - \dfrac{4\pi^6}{d_+^6 L^2} b_{\omega_0}^2 a^6 + o(a^6), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

Здесь $b_{\omega_0}$ — средняя виртуальная масса отверстия. В случае круглых отверстий $\omega_i$ радиусов $R$ ($R$ безразмерная величина) $b_{\omega_0}$ известна [11], поэтому имеем:

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \dfrac{\pi^2}{d_+^2} - \dfrac{16\pi^4}{81 d_+^6 L^2} R^6 a^6 + o(a^6), & d_+ > d_-, \\ \dfrac{\pi^2}{d^2} - \dfrac{64\pi^4}{81 d_+^6 L^2} R^6 a^6 + o(a^6), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

Рассмотрим периодическую решетку отверстий с соответствующей решеткой Браве $\Lambda_2$:

$$\Lambda_2 = \{n_1 a_1 + n_2 a_2 \in \mathbf{R}^2 | (n_1, n_2) \in \mathbf{Z}^2\},$$

где $a_1, a_2$ — линейно независимые векторы в $\mathbf{R}^2$. Пусть обратная решетка $\Gamma_2$, ячейка Вигнера–Зейтца $\hat{\Gamma}_2$ и зона Бриллюэна $\hat{\Lambda}_2$ таковы:

$$\Gamma_2 = \{n_1 b_1 + n_2 b_2 \in \mathbf{R}^2 | (n_1, n_2) \in \mathbf{Z}^2\}, \quad a_j b_{j'} = 2\pi\delta_{jj'}, \quad j, j' = 1, 2,$$

$$\hat{\Gamma}_2 = \{s_1 a_1 + s_2 a_2 \in \mathbf{R}^2 | \, s_j \in [-1/2, 1/2), \quad j = 1, 2\},$$

$$\hat{\Lambda}_2 = \{s_1 b_1 + s_2 b_2 \in \mathbf{R}^2 | \, s_j \in [-1/2, 1/2), \quad j = 1, 2\}.$$

Схема построения асимптотики та же, что и в случае цепочки, но мы заменяем функцию $f_{\Lambda_1}(k_{a,\theta})$, для которой ищется асимптотическое разложение (2) на другую $f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta})$:

$$f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta}) = |\hat{\Lambda}_2|^{-1} 4\pi^2 (|\gamma_\theta + \theta|^2 + \pi^2 d_+^{-2} - k_{a,\theta}^2),$$

$$|\gamma_\theta + \theta|^2 = \min_{\gamma \in \Gamma_2} |\gamma + \theta|^2,$$

$$f_{\Lambda_2}(k_{a,\theta}) = k_{3,\theta}^{\Lambda_2} a^3 + o(a^3).$$

Здесь также получается отсутствие лакуны для достаточно малых отверстий, а асимптотика нижней границы непрерывного спектра такова:

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \dfrac{\pi^2}{d_+^2} - |\hat{\Lambda}_2| \dfrac{\pi}{2 d_+^3} b_{\omega_0} a^3 + o(a^3), & d_+ > d_-, \\ \dfrac{\pi^2}{d^2} - |\hat{\Lambda}_2| \dfrac{\pi}{d_+^3} b_{\omega_0} a^3 + o(a^3), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

В случае круглых отверстий имеем:

$$\lambda_{\min,a} = \begin{cases} \dfrac{\pi^2}{d_+^2} - |\hat{\Lambda}_2| \dfrac{2}{9d_+^3} R^3 a^3 + o(a^3), & d_+ > d_-, \\ \dfrac{\pi^2}{d^2} - |\hat{\Lambda}_2| \dfrac{4}{9d_+^3} R^3 a^3 + o(a^3), & d_+ = d_- = d. \end{cases}$$

Работа поддержана грантом РФФИ № 01–01–00253, Минобразования РФ и ISF.

## Список литературы

[1] *Beenakker C.W.J., van Houten H.* // Solid State Physics. Advances in Research and Applications / Eds. H. Ehrenreich, D. Turnbull. V. 44. New York: Academic Press, 1991. P. 1–228.
[2] *Duclos P., Exner P.* // Rev. Math. Phys. 1995. V. 7. P. 73–102.
[3] *Exner P., Vugalter S.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1997. V. 30. P. 7863–7878.
[4] *Ильин А.М.* Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М.: Наука, 1989.
[5] *Гадыльшин Р.Р.* // Алгебра и анализ. 1992. Т. 4. № 2. С. 88–115.
[6] *Попов И.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 3. С. 57–59.
[7] *Popov I.Yu.* // Rep. Math. Phys. 1999. V. 43. N 3. P. 427–437.
[8] *Popov I.Yu.* // Phys. Lett. A. 2000. V. 264. N 2–3. P. 148–153.
[9] *Frolov S.V., Popov I.Yu.* // J. Math. Phys. 2000. V. 41. N 7. P. 4391–4405.
[10] *Popov I.Yu.* // Appl. Math. Lett. 2001. V. 14. P. 109–113.
[11] *Schiffer M., Szego G.* // Trans. Amer. Math. Soc. 1949. V. 67. N 1. P. 130–205.