ПРИКЛАДНА ФІЗИКА І МАТЕМАТИКА

УДК 530.145.61; 539.184.2

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ СФЕРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

И.И. Марончук, А.Н. Петраш

Севастопольский национальный университет ядерной энергии и промышленности

Рассматриваются топологические состояния в деформированных сферических квантовых точках. С использованием методов дифференциальной геометрии выведено одномерное уравнение Шрёдингера, описывающее движение частицы вдоль искривленной сферической поверхности.

Введение

В последнее время из-за своих необычных свойств квантовые точки (КТ) привлекают большой интерес исследователей во всем мире. Энергетический спектр носителей зарядов в КТ, благодаря удержанию электронов (и дырок) по трем измерениям, похож на энергетический спектр атомов и молекул. Однако если частица в КТ удерживается в окрестности наноразмерной поверхности, то могут возникать локализованные вдоль этой поверхности состояния. Это открывает широкие возможности в конструировании различных наноприборов и наносенсоров на основе материалов с КТ.

Особый интерес представляет применение квантовых точек в солнечных батареях 3-го поколения. КПД таких устройств может превышать 50 %. Одной из наиболее распространенных форм квантовых точек является сфера. Такие объекты в первом приближении могут быть описаны моделью сферической квантовой ямы. Однако все получаемые на практике квантовые точки имеют деформированную поверхностную структуру. Возникает закономерный вопрос о влиянии таких деформаций на характер движения частиц в квантовой точке, на состояния и энергетический спектр носителей зарядов. Такой вопрос является актуальным как с теоретической, так и, особенно, с практической точки зрения создания высокоэффективных солнечных элементов и удешевления процесса их получения.

Начало исследованиям по поверхностным состояниям квантоворазмерных объектов положил да Коста в своей классической работе [1]. Позже Энциноза и Этеманди [2] рассмотрели эту проблему, используя мощный аппарат дифференциальных форм. Для нанотрубок Кантеле, Ниньо и Иадонизи [3] провели анализ топологических поверхностных состояний для деформированных квантовых трубок. На основании полученных численных результатов они объяснили спектр поглощения и испускания света пористым силиконом.

Указанные выше работы имели дело с квантовыми нитями – наногетероструктурами, описывающимися цилиндрами конечной, но довольно большой длины по сравнению с радиусом их основания, имеющего размеры порядка нескольких нанометров.

Для моделей сферических квантовых ям, которые описывают в первом приближении сферические квантовые точки, исследование влияния деформации поверхности на энергетический спектр частиц еще никем не проводилось.

Постановка цели и задач научного исследования

Целью данной научной работы является нахождение адекватного описания характера движения носителей зарядов возле искривленной поверхности бесконечно глубокой квантовой точки. Для достижения указанной цели необходимо получить одномерное уравнение Шредингера, описывающего движение частицы вдоль искривленной сферической поверхности, обладающей симметрией вращения вокруг оси z.

Результаты исследования

Рассмотрим частицу массой m, движущуюся по поверхности S, которая описывается параметрическим уравнением $\vec{r} = \vec{r}(q_1, q_2)$, где $\vec{r}$ – это радиус-вектор произвольной точки P на этой поверхности. В окрестности этой точки, если она не является особой точкой поверхности, трехмерное пространство может быть параметризовано следующим образом:

$$\vec{R}(q_1, q_2, q_3) = \vec{r}(q_1, q_2) + q_3 \vec{N}(q_1, q_2), \tag{1}$$

где $\vec{N}(q_1, q_2)$ – единичный нормальный вектор к поверхности S, являющийся одновременно непрерывной функцией координат q_1 и q_2. Абсолютное значение координаты q_3 для несингулярных точек является расстоянием между поверхностью S и точкой Q с координатами $(q_1,\ q_2,\ q_3)$.

Квадрат расстояния между двумя бесконечно близкими точками на поверхности S дается первой квадратичной формой поверхности

$$ds^2 = \sum_{i,j=1}^{2} g_{ij} dq_i dq_j .$$

Здесь g_{ij} – симметричный тензор (т.н. метрический тензор или просто метрика), имеющий компоненты $(\partial\vec{r}/\partial q_i \cdot \partial\vec{r}/\partial q_j)$.

Площадь элемента поверхности $dS = \sqrt{g}\, dq_1 dq_2$, где $g = \det(g_{ij}) = \left|\partial\vec{r}/\partial q_i \times \partial\vec{r}/\partial q_j\right|$, а вектор нормали $\vec{N}(q_1, q_2)$ дается выражением

$$\vec{N}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\frac{\partial\vec{r}}{\partial q_1} \times \frac{\partial\vec{r}}{\partial q_2} \right). \tag{2}$$

Скалярное произведение между бесконечно малым изменением радиус-вектора на поверхности $d\vec{r}$ и соответствующей вариацией $d\vec{N}$ вектора нормали $\vec{N}$, взятое с обратным знаком, дается второй квадратичной формой поверхности

$$-d\vec{r} \cdot d\vec{N} = h_{ij} dq_i dq_j ,$$

где $h_{ij} = \vec{N} \cdot \partial^2\vec{r} / \partial q_i \partial q_j$.

Так как вариация вектора нормали $\vec{N}(q_1, q_2)$ лежит в касательной плоскости, то мы имеем

$$\frac{\partial \vec{N}}{\partial q_i} = a_{ij} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}$$

и

$$\begin{aligned} a_{11} &= (1/g)(g_{12}h_{21} - g_{22}h_{11}), \\ a_{12} &= (1/g)(g_{21}h_{11} - g_{11}h_{21}), \\ a_{21} &= (1/g)(g_{12}h_{22} - g_{22}h_{12}), \\ a_{22} &= (1/g)(g_{12}h_{21} - g_{11}h_{22}). \end{aligned}$$

Это – так называемые уравнения Вейнгартена.

В трехмерной окрестности поверхности S компоненты метрического тензора даются выражением

$$G_{ij} = G_{ji} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_j}, \quad \text{где } i, j = 1, 2, 3.$$

Используя выражения (1) и (2), легко можно получить, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_i} &= \sum_{j=1}^{2} \left(d_{ij} + a_{ij} q_3 \right) \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_j}, \quad i, j = 1, 2 \\ \frac{\partial \vec{R}}{\partial q_3} &= \vec{N}(q_1, q_2). \end{aligned}$$

Точное выражение для компонент G_{ij} следующее:

$$G_{ij} = g_{ij} + q_3 \left[\mathbf{ag} + (\mathbf{ag})^T \right]_{ij} + q_3^2 \left[\mathbf{aga}^T \right]_{ij}, \quad \text{где } i, j = 1, 2. \tag{3}$$

Здесь **a** и **g** – матрицы, чьи элементы есть a_{ij} и g_{ij}, а T означает транспонирование матрицы. Так как переменная q_3 выбрана как нормальная к касательной плоскости поверхности, то мы имеем $G_{i3} = G_{3i} = 0$ для $i, j = 1, 2$ и $G_{33} = 1$.

Теперь все готово для того, чтобы выписать уравнение Шредингера. Используя известное выражение для лапласиана в криволинейных координатах $(q_1,\ q_2,\ q_3)$, стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} \bar{G}_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_j} \right) \right) + V(q_3)\psi = E\psi, \tag{4}$$

где G – детерминант матрицы **G** с элементами G_{ij}, $\bar{G}_{ij}$ – обратный метрический тензор (т.е. отношение между алгебраическим дополнением элемента G_{ij} и G). И наконец, $V(q_3)$ – удерживающий потенциал в направлении нормали к поверхности S. Так как $G_{i3} = G_{3i} = 0$ для $i, j = 1, 2$, уравнение (4) может быть записано следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \sum_{i,j=1}^{2} \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\sqrt{G} \bar{G}_{ij} \frac{\partial \psi}{\partial q_i} \right) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial q_3^2} + \frac{\partial}{\partial q_3} (\ln \sqrt{G}) \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right] + V(q_3)\psi = E\psi. \tag{5}$$

С использованием выражения (3) элемент объема может быть представлен как

$$dV = \sqrt{G}dq_1dq_2dq_3 = \sqrt{g}\left[1+\mathrm{tr}(a_{ij})q_3+\det(a_{ij})q_3^2\right]dq_1dq_2dq_3 = hdSdq_3,$$

где $h = 1+\mathrm{tr}(a_{ij})q_3+\det(a_{ij})q_3^2$. Если волновую функцию y представить в виде

$$y\,(q_1,q_2,q_3) = \frac{c\,(q_1,q_2,q_3)}{\sqrt{h(q_1,q_2,q_3)}},$$

то после подстановки в уравнение (5) можно получить следующее выражение для c :

$$-\sum_{i,j=1}^{2}\frac{\sqrt{h}}{\sqrt{G}}\frac{\partial}{\partial q_i}\left[\sqrt{G}\bar{G}_{ij}\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{c}{\sqrt{h}}\right)\right]-\frac{\partial^2 c}{\partial q_3^2}-\frac{1}{4h^2}(h_1^2-2hh_2)c+V(q_3)c=ec\,, \qquad (6)$$

где $e = 2m^*E/\mathbf{h}^2$, $h_1 = \partial h/\partial q_3$ и $h_2 = \partial^2 h/\partial q_3^2$.

Если предположить, что потенциал $V(q_3)$ является потенциалом сил притяжения и отличен от нуля в тонком слое возле поверхности (другими словами, что частица ограничена в движении вдоль нормали к поверхности), можно перейти к пределу $q_3 \to 0$. В этом случае легко показать, что уравнение (6) может быть решено методом разделения переменных. Это означает, что волновая функция c может быть записана как

$$c\,(q_1,q_2,q_3) = s\,(q_1,q_2)\,p(q_3)\,,$$

где $p(q_3)$ является решением одномерного уравнения Шредингера

$$-\frac{d^2p}{dq_3^2}+V(q_3)=e_n p,$$

а $s\,(q_1,q_2)$ – решением следующего двумерного уравнения Шредингера

$$-\sum_{i,j=1}^{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\sqrt{g}\bar{g}_{ij}\frac{\partial s}{\partial q_j}\right)-\left(\frac{T^2}{4}-D\right)s=(e-e_n)s\,, \qquad (7)$$

где $T = \mathrm{tr}(a_{ij})$ и $D = \det(a_{ij})$ – это, соответственно, квадрат средней кривизны, взятой с обратным знаком, и гауссова кривизна поверхности. Здесь $\bar{g}_{ij}$ – обратный метрический тензор на поверхности S.

Вероятность нахождения частицы в элементе объема dV будет

$$dP = \left|y\,(q_1,q_2,q_3)\right|^2 dV = \left|s\,(q_1,q_2)\right|^2\left|p(q_3)\right|^2 dSdq_3.$$

Так как $\int\left|p(q_3)\right|^2 dq_3 = 1$, то величина $\left|s\,(q_1,q_2)\right|^2 dS$ дает вероятность нахождения частицы на элементе поверхности dS для произвольного значения координаты q_3.

Рассмотрим деформированную сферическую КТ:

$$x = R(q,j)\cos(q)\cos(j),\;\; y = R(q,j)\cos(q)\sin(j),\;\; z = R(q,j)\sin(q)\,.$$

Угловые параметры имеют стандартный диапазон изменений: $0 \le q \le p$, $0 \le j \le 2p$. Элементами метрического тензора являются

$$g_{11} = R_q^{'2} + R^2, \quad g_{1,2} = R_q^{'} R_j^{'}, \quad g_{2,2} = R_j^{'2} + R^2 \cos^2(q).$$

В случае, когда R не зависит от q либо от j, метрический тензор диагонален.

Рассмотрим случай, когда R зависит только от q. В этом случае элементы матриц **g**, **h** и **a** будут

$$g_{11} = R_q^{'2} + R^2, \quad g_{12} = g_{21} = 0, \quad g_{22} = R^2 \cos^2 q,$$
$$h_{11} = -f(q)(RR_{qq}^{"} - 2R^{'2} - R^2), \; h_{12} = h_{21} = 0, \; h_{22} = f(q)R\cos q(R_q^{'} \sin q + R\cos q),$$
$$a_{11} = f^3(q)(RR_{qq}^{"} - 2R^{'2} - R^2), \; a_{12} = a_{21} = 0, \; a_{22} = -\frac{f(q)(R_q^{'} \sin q + R\cos q)}{R\cos q}$$

где $f(q) = \left[R_q^{'2} + R^2 \right]^{-1/2}$.

Кроме того, получаем

$$T(q) = \frac{f^3(q)}{R\cos q}\left[(R_{qq}^{"}R - 3R_q^{'2} - 2R^2)R\cos q - \frac{R_q^{'} \sin q}{f^2(q)} \right],$$
$$D(q) = \frac{f^4(q)}{R\cos q}\left[(RR_{qq}^{"} - 2R_q^{'2} - R^2)(R_q^{'} \sin q + R\cos q) \right],$$
$$g(q) = \frac{R^2 \cos^2 q}{f^2(q)}.$$

После подстановки этих выражений в уравнение (7) получаем двумерное уравнение Шредингера, описывающее топологические состояния для деформированных сферических квантовых точек. Это двумерное уравнение содержит члены с второй производной по q и j, а также член с первой производной по q. Для того чтобы исключить такой член с первой производной, представим s -функцию в виде

$$s(q, j) = \frac{e^{imj}}{\sqrt{2p}} \frac{t(q)}{\sqrt{fR\cos q}}.$$

Здесь был учтен тот факт, что из-за имеющейся в системе вращательной системы угловая часть волновой функции записывается в виде $e^{imj} / \sqrt{2p}$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ и $m\mathbf{h}$ - проекция углового момента на ось симметрии z. После некоторых вычислений получаем

$$-f^2 \frac{d^2 t}{dq^2} - \left[f^2 \left(\frac{d\Gamma}{dq} - \Gamma^2 \right) + \left(\frac{T^2}{4} - D \right) - \frac{m^2}{R^2 \cos^2 q} \right] t = (e - e_n) t, \qquad (8)$$

где $\Gamma = -\frac{1}{2fR\cos q} \frac{d}{dq}\left(fR\cos q \right)$ − «одномерный символ Кристоффеля».

Уравнение (8) – это одномерное уравнение Шрёдингера для частицы с эффективной массой f^{-2}, двигающейся в эффективном топологическим потенциале

$$V_{top}(q) = -f^2\left(\frac{d\Gamma}{dq} - \Gamma^2\right) - \left(\frac{T^2}{4} - D\right) + \frac{m^2}{R^2\cos^2 q}.$$

Отметим тот факт, что уравнение (8) совпадает по форме с уравнением (23) из работы [3], где было получено аналогичное выражение для деформированного случая, за исключением последнего слагаемого в квадратных скобках. Вообще, для произвольной двумерной системы, допускающей описание с помощью ортогональной системы координат, характеризующейся метрическим тензором g_{ij} и имеющей вращательную симметрию по второй координате, последний член в квадратных скобках в уравнении (8) будет иметь вид

$$\frac{m^2}{(g_{22})^2}.$$

Зная вид деформации, то есть зависимость $R(q)$, можно решать соответствующее уравнение Шрёдингера. Однако найти решение в аналитическом виде практически невозможно. Необходимо подбирать соответствующий анзац для поиска частных решений или же решать уравнение численно. Авторы планируют вернуться к этому вопросу в следующих работах.

Выводы

Было выведено одномерное уравнение Шрёдингера, описывающее топологические состояния в деформированных сферических квантовых точках. Зная вид конкретной деформации, можно искать решения такого уравнения. Практически для всех случаев искривленной поверхности такое решение находится только численно.

Мы показали, что электронная структура квантовых точек может иметь богатую структуру в случае деформированной поверхности этих точек: появляются дополнительные энергетические состояния, связанные с геометрическими и, в особенности, с топологическими свойствами поверхности самих точек. Это открывает широкие перспективы к использованию несферических квантовых точек в различных отраслях техники и ставит новые задачи перед бурно развивающейся в настоящее время наноинженерией.

ТОПОЛОГІЧНІ СТАНИ В ДЕФОРМОВАНИХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

І.І. Марончук, О.М. Петраш

Розглядаються топологічні стани в деформованих сферичних квантових точках. Використовуючи методи диференціальної геометрії, виведене одномірне рівняння Шредінгера, що описує рух частинки вздовж викривленої сферичної поверхні.

TOPOLOGICAL STATES in DEFORMED SPHERICAL QUANTUM DOTS

I. Maronchuk, A. Petrash

Topological states in deformed spherical quantum dots were considered. Using the differential geometry methods one-dimensional Schrödinger equation described the particle movement along the curved spherical surface has been obtained.

Список использованных источников

1. *Costa R.C.T.* Quantum mechanics of a constrained particles / *R.C.T. Costa* // Physical Reviews A. – 1981 – V. 24. – P. 1982 - 1987.
2. *Encinosa M.* Energy shift from surface curvative of quantum nanostructures / M. Encinosa, B. Etemandi // Physical Review A. – 1998 – V. 58. – P. 77 - 81.
3. *Cantele G.* Topological surface states in deformed quantum wires / G. Cantele, D. Ninno, G. Iadonisi // Physical Review B. – 2000. – V. 61. – P. 13730 - 13736.

Надійшла до редакції 19.02.13 р.

УДК 621.317.75 : 519.87

ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ МЕТОДА ГАРМОНИЧЕСКОГО БАЛАНСА ПРИ АНАЛИЗЕ ЗАТУХАЮЩИХ КОЛЕБАНИЙ

В.Г. Хромов, О.В. Хромов

Севастопольский национальный технический университет

Приведены результаты сравнительного анализа численного решения дифференциального уравнения свободных затухающих колебаний и приближенного аналитического решения для скоростной модели трения.

Введение

При выборе математической модели трения на основе экспериментальных осциллограмм колебаний широко используется метод гармонического баланса или метод медленно изменяющейся амплитуды. Для определенного класса задач он позволяет получить конечные аналитические зависимости амплитуды от времени $a(t)$. Метод подробно излагается в классических монографиях по теории колебаний различных авторов [1, 2]. Данная работа посвящена изучению двух важных вопросов: 1) на основании какого количественного параметра можно считать, что затухание является «медленным»; 2) какова погрешность метода, если затухающие колебания являются «не достаточно медленными» или изменяется вид функции трения?

Постановка цели научного исследования

Цель работы: оценка точности метода гармонического баланса путем сравнительного анализа приближенных и точных осциллограмм затухающих колебаний.

Результаты исследований

Рассмотрим механическую систему с одной степенью свободы, расчетная схема которой представлена на рис. 1. Тело массой m подвешено на упругой связи. Предполагается, что система обладает собственным демпфирующим свойством, которое ото-