

С. А. Ботман, С. Б. Лебле

**ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАССЕЙЯНИЯ ЗОННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ
В АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ НА ПРИМЕСЯХ В ПРИБЛИЖЕНИИ
ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА**

Рассматривается проблема рассеивания связанных электронов атомной цепочки в трехмерном пространстве на атомах примесей. Для описания зонных электронов используются блоховские функции, построенные с учетом симметрии системы. При этом для описания как потенциалов отдельных атомов цепочки, так и потенциалов примесей используется приближение потенциалов нулевого радиуса.

In this work the problem of electron bound to 3d linear atom chain scattering on impurity atoms is considered. In order to describe zone electrons the Bloch functions are constructed with respect to symmetry consideration. In addition, zero range potential approximation is used to model both atoms in chain and impurity atoms.

Ключевые слова: блоховские функции, рассеяние, примесь, потенциал нулевого радиуса.

Keywords: Bloch wavefunction, scattering, impurity, zero range potential.

Введение

В основе потенциалов нулевого радиуса (ПНР) [1] лежит замена реального потенциала атома соответствующим граничным условием в точке расположения атома, что позволяет получать точные решения для целого класса задач. Одним из основных условий данного приближения является относительная малость энергий частиц, движущихся в искомом потенциале. Для таких частиц длина волны де Бройля будет велика, что позволяет не учитывать в рассмотрении точную форму и параметры реального потенциала и заменить его ПНР.

Метод ПНР был успешно применен для описания значительного числа наблюдаемых явлений, включая межзонные переходы в нанотрубках [2], эффект Рамзауэра для электрон-молекулярного рассеяния [3]. Также был проведен ряд попыток использовать ПНР для описания электронного транспорта в квазиодномерных периодических структурах [4; 5]. К таким структурам относятся нанонити, которые находят применение в различных областях, включая наносенсоры, транзисторы и квантовые компьютеры.

Принципиальным отличием рассеяния зонного электрона от свободного является необходимость его описания с позиций блоховских функций. В данной работе рассматривается вопрос построения таких функций, а также постановки задачи рассеяния с их использованием.



Функции Блоха

Рассмотрим линейную цепочку эквидистантно расположенных атомов в трехмерном пространстве. Потенциал такой цепочки будет задаваться следующей суммой:

$$V(\vec{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0(\vec{r} - n\vec{a}), \quad (1)$$

где V_0 — потенциал отдельного атома, \vec{a} — вектор расстояния между соседними атомами.

30

Далее, будем считать, что длина волны зонных электронов данной цепочки велика, что позволяет нам использовать приближение ПНР. Согласно простейшему варианту данного приближения, учитывающему только s состояния, точный потенциал атома V_0 , расположенного в точке \vec{R}_s , можно заменить следующим граничным условием, накладываемым на волновую функцию электрона Ψ :

$$\lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{R}_n} \left(\frac{\partial}{\partial |\vec{r} - \vec{R}_n|} (|\vec{r} - \vec{R}_n| \Psi) - \alpha |\vec{r} - \vec{R}_n| \Psi \right) = 0, \quad (2)$$

где параметр α описывает мощность потенциала.

Затем введем цилиндрическую систему координат (ρ, ϕ, z) таким образом, что ось z сонаправлена с вектором \vec{a} и проходит через все атомы цепочки. Нас будут интересовать связанные состояния электронов в этой цепочке. Волновые функции для таких электронов необходимо искать как собственные функции полного набора коммутирующих операторов. В случае цепочки атомов таким набором будут следующие операторы:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}), \quad (3)$$

— оператор Гамильтона, где \hbar — постоянная планка; m — масса электрона; $V(\vec{r})$ — полный потенциал цепочки (1);

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\phi}, \quad (4)$$

— оператор проекции момента импульса;

$$\hat{T}_a \psi(\rho, \phi, z) = \psi(\rho, \phi, z + a), \quad (5)$$

— оператор трансляции на вектор \vec{a} .

Очевидно, эти операторы коммутируют

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{T}_a, \hat{L}_z] = 0$$

и образуют в трехмерном пространстве полный набор.



Соответственно, для нахождения блоховской волновой функции необходимо решить задачи на собственные значения и функции для операторов (3)–(5).

Поставим для начала задачу на собственные значения оператора трансляции:

$$\hat{T}_a \xi(z) = \xi(z+a) = \nu \xi(z), \quad (6)$$

где μ – собственное значение оператора \hat{T}_a .

Из требования конечности функции ξ при $z \rightarrow \pm\infty$ следует, что $|\nu| = 1$. С учетом линейности оператора \hat{T}_a можно записать

$$\nu = e^{i\kappa a}. \quad (7)$$

Задачу на собственные значения оператора \hat{L}_z с учетом явного вида оператора в введенной системе координат можно записать следующим образом:

$$\hat{L}_z \zeta(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \zeta(\phi) = \hbar \mu \zeta(\phi), \quad (8)$$

где μ – собственное значение оператора \hat{L}_z . Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$\zeta(\phi) = e^{i\mu\phi}, \quad \mu \in \mathbb{Z}. \quad (9)$$

В гамильтониане (3) в случае приближения ПНР полный потенциал обращается в ноль, поэтому собственные функции будут соответствовать таковым для пустого пространства. Таким образом, с учетом требований накладываемых граничными условиями и симметрией системы, удобным будет представить полную волновую функцию в виде следующей суммы:

$$\psi_{k,\kappa,\mu}(\vec{r}) = C(k, \kappa, \mu) e^{i\mu\phi} \sum_n f_n \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|}, \quad (10)$$

где $\vec{R}_n = n\vec{a}$. Значение коэффициента f_n находится из уравнений (6) и (7):

$$f_n = \nu^n = e^{i\kappa n a}. \quad (11)$$

Далее, подставим полученную волновую функцию (10) в стационарное уравнение Шредингера для области пространства вне точек \vec{R}_n :

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} C(k, \kappa, \mu) \left[e^{i\mu\phi} \Delta \sum_n e^{i\kappa n a} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} + \right.$$



$$\begin{aligned}
& + (\Delta e^{i\mu\phi}) \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} + 2\vec{\nabla} e^{i\mu\phi} \cdot \vec{\nabla} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} \Big] = \\
& = -\frac{\hbar^2}{2m} (-\mu^2 + k^2) \psi = E\psi.
\end{aligned} \tag{12}$$

Таким образом, мы получили связь между энергией и квантовыми числами:

$$k^2 - \mu^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}. \tag{13}$$

32

Подставив волновую функцию (10) в граничное условие (2) для атома m , получим:

$$\sum_{n \neq m} e^{ikna} \frac{e^{-k|m-n|a}}{|m-n|a} - e^{ikma} (k + \alpha) = 0. \tag{14}$$

Если ввести $q = |m-n|$, то сумму в (14) можно преобразовать следующим образом:

$$2 \sum_{q=1}^{\infty} \cos(\kappa qa) \frac{e^{-kqa}}{qa} = k + \alpha. \tag{15}$$

Из полученного уравнения можно получить информацию о зонной структуре потенциала (1).

Задача рассеяния

Для расчета вероятностей рассеяния удобно будет воспользоваться нормировкой волновой функции (10) на единицу потока. При этом в зависимости от знака волнового числа k_z поток может быть как положительным, так и отрицательным. Введем обозначения ψ_{\rightarrow} и ψ_{\leftarrow} таким образом, что выполняется

$$\iint_S \hat{j}_z \psi_{\rightarrow} ds = \pm 1, \tag{16}$$

где S – плоскость, перпендикулярная оси z ; \hat{j}_z – оператор потока:

$$\hat{j}_z \psi = \frac{\hbar}{2m_e i} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial z} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial z} \psi^* \right). \tag{17}$$

Подстановка (10) в (16) с учетом (17) дает

$$\iint_S \frac{\hbar k}{2m_e} \left| C_{\leftarrow} \right|^2 \sum_{n,m} 2 \sin(\kappa(m-n)a) \times$$



$$\begin{aligned} & \times \frac{e^{-k\sqrt{\rho^2+(z-ma)^2}}}{\sqrt{\rho^2+(z-ma)^2}} \frac{e^{-k\sqrt{\rho^2+(z-na)^2}}}{(\rho^2+(z-na)^2)^{\frac{3}{2}}} \times \\ & \times (z-na) \left(k\sqrt{\rho^2+(z-na)^2} + 1 \right) ds = \pm 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Из полученного условия (18) можно получить выражение для нормированных коэффициентов C_{\rightarrow}
 C_{\leftarrow}

Далее, будем рассматривать рассеяние блоховских функций Ψ_{\rightarrow}
 Ψ_{\leftarrow} на примесном атоме, расположенном в точке $\vec{R}_s(\rho_s, \phi_s, z_s)$, ограничиваясь для простоты рассмотрением случая $\mu = 0$. Если полагать, что волна движется слева направо и с некоторой вероятностью упруго рассеивается, начиная двигаться справа налево, то анзац для для такого случая можно записать следующим образом:

$$\Psi = A_i \psi_{\rightarrow} + A_r \psi_{\leftarrow} + \psi_s, \quad (19)$$

где ψ_s – решение для связанного электрона в потенциале атома примеси:

$$\psi_s = C_s \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_s|}}{|\vec{r}-\vec{R}_s|}. \quad (20)$$

Значение коэффициента $C_s = \sqrt{k/2\pi}$ находится из обычного условия нормировки.

Следуя приближению ПНР, подставим (19) в граничное условие для примеси:

$$\lim_{\vec{r}-\vec{R}_s \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial |\vec{r}-\vec{R}_s|} (|\vec{r}-\vec{R}_s| \Psi) - \beta |\vec{r}-\vec{R}_s| \Psi \right) = 0, \quad (21)$$

где β – выражает мощность потенциала рассеивателя.

В результате получим

$$\begin{aligned} & A_i C_{\rightarrow} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} + \\ & + A_r C_{\leftarrow} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} - C_s k - C_s \beta = 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Полагая $A_i = 1$ и учитывая, что $C_{\rightarrow} = C_{\leftarrow}$, можно получить

$$A_r = \frac{C_s}{C_{\leftarrow}} (k + \beta) \left[\sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} \right]^{-1} - \frac{C_{\rightarrow}}{C_{\leftarrow}}. \quad (23)$$



Заключение

Полученный результат в дальнейшем можно использовать для расчета электронных транспортных такой системы с использованием кинетической теории. Также дальнейшее развитие подхода будет направлено на описание более сложных конфигураций квазиодномерных структур и рассеивателей.

Список литературы

34

1. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
2. Тищенко С.В. Зонная структура и межзонные переходы в углеродных нанотрубках : дис. ... канд. физ.-мат. наук. Одесса, 2007.
3. Yalunin S., Leble S.B. Multiple-scattering and electron-uracil collisions at low energies // The European Physical Journal Special Topics. 2007. Vol. 144, №1. P. 115–122.
4. Botman S.A., Leble S.B. Bloch wave – ZRP scattering as a key element of solid state physics computation: 1D example // TASK Quarterly. 2016. Vol. 20, №2. P. 197–206.
5. Botman S.A., Leble S.B. Electrical conductivity model for quasi-one-dimensional structures // Наносистемы: физика, химия, математика. 2017. Т. 8, №2. С. 231–235.
6. Leble S.B. Cyclic-periodic ZRP structures. Scattering problem for generalized Bloch functions and conductivity // Наносистемы: физика, химия, математика. 2018. Т. 9, №2. С. 225–243.

Об авторах

Степан Александрович Ботман — мл. науч. сотр., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: SBotman@kantiana.ru

Сергей Борисович Лебле — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: lebleu@mail.ru

The authors

Stepan A. Botman, Junior Research Fellow, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: SBotman@kantiana.ru

Prof. Sergey B. Leble, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: lebleu@mail.ru