

С.Л. АРУТЮНЯН, А.А. ДЖИВАНЯН, Г.О. ДЕМИРЧЯН

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ НАНОСЛОЕ  
ПРИ НАЛИЧИИ ПРОДОЛЬНОГО ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО  
ПОТЕНЦИАЛА КОНЕЧНОЙ ВЫСОТЫ**

*(Гюмри)*

В рамках адиабатического приближения исследованы особенности электронных состояний в цилиндрическом нанослое при наличии продольного дополнительного потенциала конечной высоты. Получены волновые функции и дисперсионное уравнение для определения энергетического спектра электронов.

**Ключевые слова:** эффективная высота, барьер, нанослой, энергетический спектр, радиус.

**Введение.** В последнее время сильно возрос интерес к изучению физических свойств двумерного электронного газа на искривленной поверхности полупроводника в таких моделях, как квантовый цилиндр, квантовая сфера, нанотрубки различной геометрии (см., напр., [1-5]).

В большинстве теоретических работ, посвященных исследованию физических свойств цилиндрических нанослоев, обычно с самого начала предполагается, что носители зарядов локализованы на поверхности нанослоев (см., напр., [3-5]), и тем самым пренебрегается конечность толщины образца. При описании широкого круга явлений такой подход во многом оправдан, однако при этом теряется уникальное свойство квантового цилиндра – комбинация характерных физических особенностей квантовой нити и квантовой пленки [6].

Другая особенность указанного цикла работ заключается в том, что дополнительный потенциал, образуемый при росте наноструктуры, обычно моделируется либо прямым [4,5] (проходящим по образующей цилиндра), либо протяженным спиральным  $\delta$  - барьером, и тем самым пренебрегается реально существующая пространственная протяженность потенциального барьера.

В работе [7] в рамках модели бесконечно высокой потенциальной ямы исследованы электронные состояния и особенности спектра оптического поглощения в цилиндрическом нанослое с учетом как конечности толщины цилиндра, так и пространственной протяженности барьера, проходящего по образующей цилиндра.

В настоящей работе рассматривается более реалистичная модель кругового цилиндрического сектора, а именно, учитывается конечность азимутального потенциала.

**1. Основные предположения. Обоснование адиабатического приближения.** Движение электронов в нанотрубке, поперечное сечение которой показано на рисунке, одновременно ограничено в радиальном и азимутальном направлениях, а вдоль оси трубки - свободное. В этом случае ограничивающий потенциал можно представить в виде

$$U(\rho, \varphi, z) = U(\rho) + U(\varphi), \quad (1)$$

где  $U(\rho)$  - радиальный потенциал;  $U(\varphi)$  - азимутальный потенциал.

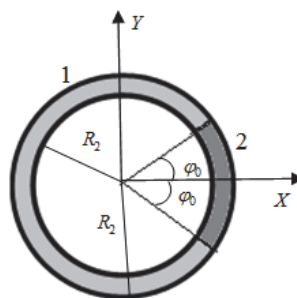


Рис. Поперечное сечение нанотрубки

Радиальный потенциал  $U(\rho)$  моделируется потенциалом бесконечной глубокой ямы, а азимутальный потенциал  $U(\varphi)$  - прямоугольной потенциальной ямой конечной высоты.

В таких условиях волновую функцию можно представить в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \psi(\rho, \varphi) \sqrt{1/L} \exp(ikz), \quad (2)$$

а соответствующее уравнение Шредингера в поперечном направлении будет иметь вид

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(\rho, \varphi) + (U(\rho) + U(\varphi)) \psi(\rho, \varphi) = E_{\perp} \psi(\rho, \varphi), \quad (3)$$

где  $E_{\perp} = E - \hbar^2 k^2 / 2\mu$  - энергия поперечного движения.

В отличие от модели бесконечной глубокой ямы, в данном случае переменные в уравнении (3) не разделяются.

В случае тонкого нанослоя, когда выполняется условие  $d/R_1 \ll 1$  (см.рис.1), из соотношения неопределенностей непосредственно вытекает

$$\tau_\rho/\tau_\varphi \propto (d/R)^2 \ll 1, \quad (4)$$

где  $\tau_\rho, \tau_\varphi$  - характерные времена движения электрона в радиальном и азимутальном направлениях соответственно. Следовательно, движение в радиальном направлении можно считать “быстрым” а в азимутальном направлении – “медленным” и применить адиабатическое приближение.

В этом приближении движение в радиальном направлении описывается уравнением

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right) \psi(\rho) + U(\rho)\psi(\rho) = E_n \psi(\rho). \quad (5)$$

Представляя решение уравнения (3) в виде  $\psi(\rho, \varphi) = \sum_k \Phi_{mk}(\varphi)\psi_k(\rho)$ ,

после стандартных действий для азимутальной волновой функции получим уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_k A_{nk} \frac{d^2 \Phi_{mk}(\varphi)}{d\varphi^2} + U(\varphi)\Phi_{mk}(\varphi) = (E - E_n)\Phi_{mk}(\varphi), \quad (6)$$

где  $A_{nk} = \int \psi_m(\rho)(1/\rho^2)\psi_k(\rho)d\rho$ .

Согласно выбранной модели, при решении уравнений (5) и (6) необходимо использовать следующие граничные условия:

а) для радиального направления:

$$U(\rho) = 0, \text{ если } R_1 \leq \rho \leq R_2; U(\rho) = \infty, \text{ если } \rho \leq R_1 \text{ или } \rho \geq R_2; \quad (7)$$

б) для азимутального направления:

$$U(\varphi) = 0, \text{ если } \varphi_0 \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_0; U(\varphi) = U_0, \text{ если } \varphi_0 \geq \varphi \geq 2\pi - \varphi_0. \quad (8)$$

## 2. Волновые функции и энергетический спектр электрона в нанослое.

Исходя из методики адиабатического приближения, сначала необходимо ре-

шить уравнение (4). Если представить радиальную часть энергии в виде  $E_n = \hbar^2 \beta / 2\mu d^2$ , то после несложных преобразований легко убедиться, что решение (4) будет иметь вид

$$\psi_\beta(\rho) = C_1 J_0\left(\frac{\beta\rho}{d}\right) + C_2 N_0\left(\frac{\beta\rho}{d}\right), \quad (9)$$

где  $J_0(x)$  и  $N_0(x)$  - соответственно функции Бесселя и Неймана нулевого порядка.

С учетом граничных условий (7) для определения радиальной части энергии электрона получим следующее дисперсионное уравнение:

$$J_0\left(\frac{\beta R_1}{d}\right) N_0\left(\frac{\beta R_2}{d}\right) - J_0\left(\frac{\beta R_2}{d}\right) N_0\left(\frac{\beta R_1}{d}\right) = 0. \quad (10)$$

Учитывая условие (4) и используя асимптотическое разложение Ганкеля для функций Бесселя и Неймана (см., напр., [8]) из (10) и (9), для радиальной волновой функции и энергетического спектра получим соответственно

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\pi}{d}\right)^2 n^2, \quad (11)$$

$$\psi_n(\rho) = \sqrt{\frac{2}{d\rho}} \sin \frac{\pi n(\rho - R_1)}{d}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (12)$$

Имея в виду (12), легко убедиться, что в рамках приближения (4) имеем

$$A_{nk} \equiv \frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}} \delta_{nk}. \quad (13)$$

Следует отметить, что состояния азимутального движения симметричны по отношению к оси  $X$  (равноудаленные точки от краев барьера физически эквивалентны), так что волновые функции (4) обладают определенной четностью относительно преобразования  $\varphi \rightarrow 2\pi - \varphi$ .

Легко убедиться, что по отношению к указанному преобразованию волновые функции, удовлетворяющие уравнению (6), подразделяются на четные и нечетные и с учетом (13) соответственно имеют вид:

в области  $\varphi_0 \leq \varphi \leq 2\pi - \varphi_0$ :

$$\Phi_1(\varphi) = A \cos \lambda(\pi - \varphi) - \text{четные состояния}, \quad (14)$$

$$\Phi_1(\varphi) = B \sin \lambda(\pi - \varphi) - \text{нечетные состояния};$$

в области  $\varphi_0 \geq \varphi \geq 2\pi - \varphi_0$ :

$$\Phi_2(\varphi) = C \operatorname{ch} \chi \varphi - \text{четные состояния}, \quad (15)$$

$$\Phi_2(\varphi) = D \operatorname{sh} \chi \varphi - \text{нечетные состояния}.$$

где введены следующие обозначения:

$$E_0 = E - E_n \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\pi^2 \beta^2}{[2(\pi - \varphi_0)R]^2}, \quad \lambda = \frac{\pi \beta}{2(\pi - \varphi_0)}, \quad \chi = \frac{\pi \sqrt{P - \beta^2}}{2(\pi - \varphi_0)}. \quad (16)$$

Здесь  $P = 8\mu(\pi - \varphi_0)^2 R^2 U_0 / \pi^2 \hbar^2$  - “мощность” азимутальной квантовой ямы;  $\beta$  - параметр, который определяется из условий непрерывности (см. ниже).

Можно доказать, что в силу вышеуказанной симметрии можно использовать непрерывность волновых функций (14) и (15) только на одной границе примыкания:

$$\Phi_1(\varphi_0) = \Phi_2(\varphi_0), \quad \Phi_1'(\varphi_0) = \Phi_2'(\varphi_0). \quad (17)$$

Тогда, используя (13)-(16), из (17) получаются следующие дисперсионные уравнения для определения параметра  $\beta$ :

четные состояния:

$$\beta \operatorname{tg} \pi \beta / 2 = \sqrt{P - \beta^2} \operatorname{th} \left( \pi \sqrt{P - \beta^2} \varphi_0 / 2(\pi - \varphi_0) \right); \quad (18)$$

нечетные состояния:

$$\beta \operatorname{ctg} \pi \beta / 2 = -\sqrt{P - \beta^2} \operatorname{cth} \left( \pi \sqrt{P - \beta^2} \varphi_0 / 2(\pi - \varphi_0) \right). \quad (19)$$

Таким образом, имея в виду (3),(11),(13),(16), для энергетического спектра электронов будем иметь

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\pi}{d} \right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\pi^2 \beta^2}{[2(\pi - \varphi_0)R]^2} + \hbar^2 k^2 / 2\mu,$$

где параметр  $\beta$  определяется из уравнений (18) и (19).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Margulis V. A., Pyataev M. A.** Electron transport on a cylindrical surface with one-dimensional leads // Phys. Rev. B. -2005.-V. 72. -P. 75312.
2. **Магарил Л.И., Чаплик А.В., Энтин М.В.** Спектр и кинетика электронов в криволинейных наноструктурах //УФН. – 2005.-175(9). -С.996-1000.
3. **Grigor`kin A.A., Dunaewskii S.M.** //Physics of Solid State. -2007.-V. 49, N 3. -P. 585-590.
4. **Grigor`kin A.A., Dunaewskii S.M.** //Physics of Solid State. -2008.-V. 50. N 3. -P. 525-530.
5. **Grigor`kin A.A., Dunaewskii S.M.** //Physics of Solid State.- 2009.-V. 51, N 2. -P. 427-434.
6. **Harutyunyan V.A., Harutyunyan S.L., Demirjan G.H., Gasparyan N.H.** //Journal of Contemporary Physics. – 2008.-43 (5).- P.218-225.
7. **Harutyunyan S.L., Demirjan G.H., Jivanyan H.A.** // Physica B. - 2014.- 446. - P. 6–11.
8. **Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M.** Table of Integrals, Series, and Products.- Academic Press, Inc., 1994.- P.1020.

**Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Ա. ԶԻՎԱՆՅԱՆ, Գ.Հ. ԴԵՄԻՐՃՅԱՆ**

**ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՆԱՆՈՇԵՐՏՈՒՄ ԼՐԱՑՈՒՑԻՉ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ԲԱՐՁՐՈՒԹՅԱՄԲ ԵՐԿԱՅՆԱԿԱՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ**

Ադիաբատիկ մոտավորությամբ հետազոտված են էլեկտրոնային վիճակների յուրահատկությունները գլանային նանոշերտում՝ վերջավոր բարձրությամբ երկայնական պոտենցիալի առկայությամբ. Ստացվել են էլեկտրոնների ալիքային ֆունկցիաները և էներգիական սպեկտրը որոշող դիսպերսիոն հավասարումները:

**Առանցքային բառեր.** արդյունաբար հաստություն, արգելք, նանոշերտ, էներգիական սպեկտր, շառավիղ:

**S.L. HARUTYUNYAN, H.A. JIVANYAN, G.H. DEMIRCHYAN**

**ELECTRONIC STATES IN THE CYLINDRICAL NANOLAYER IN THE PRESENCE OF A LONGITUDINAL POTENTIAL OF A FINITE VALUE**

In the frames of adiabatic approximation, the specific features of electronic states are investigated in the cylindrical nanolayer in the presence of a longitudinal potential of finite height. The wave functions, and the dispersion equation for revealing the energy spectrum of electrons are obtained.

**Keywords:** effective thickness, barrier, nanolayer, energy spectrum, radius.