

А. М. Р у ц к а я

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ ПРИ ВЫРОЖДЕНИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В СЛУЧАЕ СИСТЕМ ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТИ**

*Рассмотрены наноразмерные системы невзаимодействующих фермионов с цилиндрической симметрией (квантовые проволоки), находящиеся в простейшем прямоугольном удерживающем потенциале. Показано, что для квантовых систем пониженной размерности вырождение уровней в первую очередь определяется симметрией задачи, причем в зависимости от конкретного вида потенциала оказывается возможным не только вырождение, обусловленное наличием осевой симметрии, но и случайное вырождение. Таким образом, состояние с одной и той же энергией соответствует различным пространственным распределениям электронов, что приводит к расхождению результатов для электронной плотности, определяющей в частности отклик системы на внешнее воздействие. Из этого следует, что привычный метод оценки достоверности полученных при теоретическом анализе результатов — сравнение энергетических характеристик — не позволяет судить о том, насколько близок к действительности расчет электронной плотности.*

**E-mail: [anna8502@mail.ru](mailto:anna8502@mail.ru)**

**Ключевые слова:** метод функционалов плотности, нерелятивистские ферми-системы, собственные значения, вариационные методы.

В настоящее время в связи с исследованиями нанобъектов в нерелятивистской квантовой механике многочастичных систем возникла принципиально новая проблема. Она связана с тем, что в отличие от хорошо изученных объектов с известной симметрией таких, как атомы, молекулы и твердые тела макроскопических размеров с выраженной кристаллической структурой, нанобъекты не обладают предсказуемостью свойств, определенных их симметрией. Это приводит к тому, что при решении задач, связанных с описанием пространственного распределения электронного газа в таких системах, невозможно заранее предугадать те особенности, которые должны быть учтены при выборе методов решения задачи. Особенно важным это становится при реализации прямых вариационных методов, к которым так или иначе сводится решение большинства многочастичных задач.

Особое значение, в частности, приобретает ответ на вопрос о единственности основного состояния системы (т.е. о наличии вырождения), а также связанные с этим вопросы о существовании множества функционалов полной энергии основного состояния данной системы и множества решений задачи об экстремуме таких функционалов.

Помимо принципиального решения вопроса о существовании и единственности решения об экстремуме функционала полной энергии многочастичной нерелятивистской ферми-системы представляет интерес исследование этой задачи применительно к конкретным объектам, имеющим прикладное значение. В первую очередь следует обратить внимание на проблему определения электронной плотности и связанных с ней экспериментально наблюдаемых характеристик в системах пониженной размерности, изучение которых наиболее интересно в свете активного развития нанотехнологий.

Проблема состоит в том, что при реализации вычислений возникает вопрос о единственности полученного решения и о формировании критериев, позволяющих сделать вывод о достоверности полученных результатов. В настоящее время в качестве основного критерия выступает сопоставление энергетических характеристик системы, полученных в рамках используемого теоретического подхода, и их же экспериментальных значений. В то же время результаты экспериментальных исследований систем пониженной размерности могут относиться к таким характеристикам, как, например, проводимость или упругие свойства вещества, где существенное значение имеет именно пространственное распределение электронной плотности.

В работе рассмотрены наноразмерные системы с цилиндрической симметрией — квантовые проволоки.

*Квантовыми проволоками* называют структуры с квантовыми ямами, в которых движение электронов ограничено по двум направлениям и свободно в третьем (одномерные или  $1D$ -системы).

Объектом исследования служат системы невзаимодействующих фермионов, находящихся в простейшем прямоугольном удерживающем потенциале. Отметим, что даже такая элементарная модель позволяет обнаружить ряд существенных особенностей электронной плотности системы, обусловленных наличием вырождения.

Гамильтониан системы фермионов может быть представлен в виде суммы одночастичных гамильтонианов вида

$$h = -\frac{\hbar}{2\mu} \nabla^2 + U(y, z),$$

где

$$U(y, z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < y < a \text{ и } 0 < z < b; \\ \infty & \text{при } y < 0, z < 0; \\ \infty & \text{при } y > a, z > b. \end{cases} \quad (1)$$

Волновую функцию в данном случае можно рассматривать как сумму однопериодических волновых функций

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \det \|\phi_\alpha(r_\beta)\|.$$

Изучая энергетические состояния только у края невырожденной зоны с изотропным законом дисперсии, для данного профиля потенциала одночастичные нормированные волновые функции и энергетический спектр электронов можно представить в виде

$$\phi_{\alpha}(r_{\beta}) = \psi_{n,m}(x, y, z) = \left(\frac{4}{L_x ab}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi m}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi n}{b}z\right) \exp(iK_x x);$$

$$E(n, m, K_x) = \frac{\hbar^2}{2\mu} K_x^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 m^2 + \left(\frac{\pi}{b}\right)^2 n^2 \right],$$

где ось  $X$  направлена вдоль квантовой проволоки;  $K_x$  — одномерный волновой вектор, определяемый соотношением  $K_x = \frac{2\pi}{L_x} n_1$  (здесь  $n_1 = \pm 1, \pm 2, \dots$ );  $L_x$  — длина квантовой проволоки;  $a$  и  $b$  — толщина квантовой проволоки вдоль осей  $Y$  и  $Z$  соответственно (предполагается, что  $L_x \gg a$  и  $b$ );  $m, n = 1, 2, 3, \dots$  — положительные числа, характеризующие квантовые подзоны.

Электронная плотность этой системы

$$n(r) = \sum |\phi_{\alpha}(r)|^2 = \sum \left| \left(\frac{4}{L_x ab}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi m}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi n}{b}z\right) \exp(iK_x x) \right|^2.$$

Таким образом, задача оказывается точно решаемой.

Энергетический спектр квантовой проволоки разбиваем на отдельные перекрывающиеся одномерные подзоны  $E(n, m, K_x)$ , соответствующие фиксированным значениям  $n$  и  $m$ . Движение вдоль оси  $X$  оказывается свободным, а вдоль осей  $Y, Z$  — ограниченным.

Зависимость плотности состояний в квантовой проволоке от энергии, рассчитанная на единицу объема, может быть представлена в виде

$$g(E) = \frac{\sqrt{2\mu}}{\pi \hbar b a} \sum_m \sum_n \frac{\Theta(E - E_{n,m})}{\sqrt{E - E_{n,m}}}. \quad (2)$$

Согласно (2), в пределах отдельной подзоны плотность состояний уменьшается с увеличением энергии как  $\frac{1}{\sqrt{E - E_{n,m}}}$ . Полная плотность состояний представляет собой суперпозицию одинаковых убывающих функций (соответствующих отдельным подзонам), смещенных по оси энергии. Отметим также, что при  $a = b$  подзоны с квантовыми числами  $n \neq m$  оказываются дважды вырожденными.

Для квантовых систем пониженной размерности вырождение уровней в первую очередь определяется симметрией задачи, причем в зависимости от конкретного вида потенциала оказывается возможным

не только вырождение, обусловленное наличием осевой симметрии, но и случайное вырождение.

Таким образом, состояние с одной и той же энергией соответствует различным пространственным распределениям электронов, что приводит к расхождению результатов для электронной плотности, определяющей, в частности, отклик системы на внешнее воздействие. Из этого следует, что привычный метод оценки достоверности полученных при теоретическом анализе результатов — сравнение энергетических характеристик — не позволяет судить о том, насколько близок к действительности результат расчета электронной плотности.

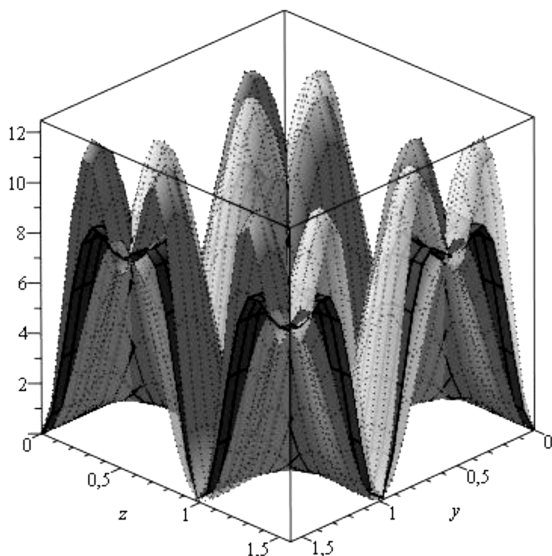
Проиллюстрируем изложенные выше соображения, выполнив численный расчет электронной плотности основного состояния в системе  $N = 4$  электронов, представляющей собой квантовую проволоку с квадратным сечением (т.е.  $a = b$ ); одноэлектронный потенциал выбран в виде (1).

На рисунке графически показаны различные распределения электронной плотности  $n(r)$ , существенно отличающиеся друг от друга, но при этом отвечающие одному значению энергии основного состояния, вычисляемому из соотношения

$$E = \sum_{n_y, n_z} \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 (n_y^2 + n_z^2) + 4 \frac{(\hbar K_x)^2}{2\mu},$$

где  $K_x = K_{x \min}$ .

Записав известное дифференциальное уравнение [1–3] для электронной плотности  $n(r)$  для системы с рассматриваемой симметрией



в виде

$$\frac{4}{3}C_k n^{7/3} - \frac{1}{72} \left( \left( \frac{\partial n}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial n}{\partial z} \right)^2 \right) + \frac{1}{36} n \left( \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \right) = 0$$

при симметричных граничных условиях, можно сделать следующий вывод: если  $n_1(y, z)$  – решение, соответствующее энергии  $E$ , то  $n_2(y, z) = n_1(z, y)$  – тоже решение, соответствующее  $E$ .

Таким образом, удалось показать, что решение вариационной задачи может приводить к одной из функций плотности, принадлежащей множеству функций плотности основного состояния данной системы. Вероятность реализации этого состояния в рамках метода функционалов плотности не может быть оценена. Следовательно, энергию основного состояния нельзя рассматривать в качестве основного критерия, выполнение которого позволяет утверждать, что полученная в результате вариационного расчета функция плотности действительно описывает распределение частиц в основном состоянии данной системы.

В случае систем пониженной размерности реализуется ситуация, когда состояние с одной и той же энергией соответствует различным пространственным распределениям электронов. Численный расчет наглядно показывает различимость пространственного распределения электронов при одинаковом значении энергий. Из этого следует, что сравнение энергетических характеристик как метод оценки достоверности полученных результатов не может считаться надежным критерием, если результаты расчета электронной плотности предполагается использовать для анализа характеристик системы, не определяемых однозначно энергией основного состояния.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dreizler R. M., Gross E. K. U. Density Functional Theory. – Berlin: Springer-Verlag, 1990. – 303 p.
2. Теория неоднородного электронного газа: пер. с англ. / Н. Марч, М. Кон, П. Вашишта, С. Лундквист, А. Уильямс, У. Барт, Н. Лэнг; под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
3. Parr R. G., Weitao Y. Density-functional theory of atoms and molecules. – Oxford: Oxford University Press, 1989.

Статья поступила в редакцию 05.07.2012