

УДК 530.145

## Осциляторно-кулонівська модель штучного атома

Понеділок Г. В., к.ф.-м.н., доц. каф. ІМПФ  
 Клапчук М. І., к.ф.-м.н., асистент. каф. ВМ

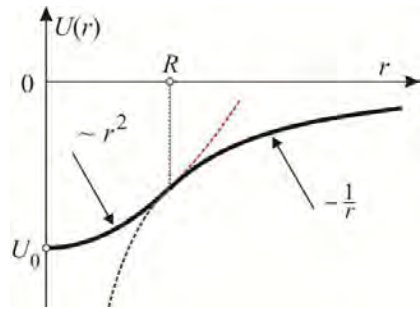
Національний університет «Львівська політехніка»  
 (вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна)

В даний час доволі активно досліджуються наносистеми, для яких характерним є явище розмірного квантування фізичних величин. Особливий інтерес представляють квантові точки, або як ще їх називають, – «штучні атоми». Ці об’єкти наносвіту вже сьогодні мають окремі практичні застосування і обґрунтовані сподівання на їх використання у квантових комп’ютерах, лазерній техніці, наноелектроніці тощо [1]. У даній роботі електронейтральна сферично-симетрична квантова точка радіуса  $R$  моделюється як система  $Z$  незважених електронів у однорідному додатньому «желе». Потенціальна енергія електрона у такій багатоелектронній квантовій точці вибирається у формі

$$U(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2R^3}(r^2 - 3R^2), & r \leq R, \\ -\frac{Ze^2}{r}, & r \geq R. \end{cases}$$

Такий потенціал ще на початку квантової фізики запропонований З. Флюгге для опису енергетичних рівнів мезоатомів [2].

Метою даної роботи є розрахунок дискретного енергетичного спектра і відповідних власних функцій електрона у сферичній квантовій точці. Задача Штурма-Ліувілля для радіального рівняння Шредінгера електрона у полі потенціалу  $U(r)$



$$-\frac{1}{r} \frac{d^2[r\Phi(r)]}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} \Phi(r) + U(r)\Phi(r) = E\Phi(r),$$

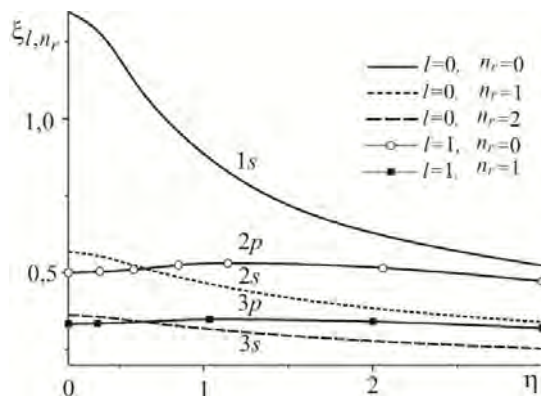
де  $l = 0; 1; 2; \dots$  – орбітальне квантове число, розв’язується наближеною процедурою, за якою на границі  $r = R$  «зшиваються» власні функції задачі про просторовий квантовий осцилятор та власні функції атома водню шляхом прирівнювання їх логарифмічних похідних. Отримано трансцендентне рівняння

$$\frac{2}{\varepsilon\sqrt{\eta}} \left( 1 - \frac{\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta})}{l + \frac{3}{2}} \right) \frac{M(a, l + \frac{5}{2}, \sqrt{\eta})}{M(a, l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta})} - \frac{2U(l + 1 - \xi^{-1}, 2l + 3, 2\xi\eta)}{U(l + 1 - \xi^{-1}, 2l + 2, 2\xi\eta)} + 1 - \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\eta}} = 0$$

корені якого визначають дискретний спектр власних значень  $E_{l,n_r} = -\xi_{l,n_r}^2$ . Цим квантовим станом електрона у квантовій точці відповідають такі радіальні частини власних функцій

$$\Phi_{l,n_r}(\rho) = a_0^{-3/2} C_{l,n_r} \begin{cases} \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l e^{-\frac{\sqrt{\eta}}{2}\left(\frac{\rho}{\eta}\right)^2 - 1} \frac{M\left(a, l + \frac{3}{2}, \frac{\rho^2}{\sqrt{\eta^3}}\right)}{M\left(a, l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)}, & \rho < \eta, \\ \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l \frac{e^{-\xi_{l,n_r}\rho} U(l + 1 + \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l + 1, 2\xi_{l,n_r}\rho)}{e^{-\eta\xi_{l,n_r}} U(l + 1 + \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l + 1, 2\xi_{l,n_r}\eta)}, & \rho > \eta, \end{cases}$$

Тут  $M(a, b, x)$  – гіпергеометрична функція з аргументом  $a = \frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}\right)$ . Функція  $U(a, b, x)$  пов'язана з гіпергеометричною функцією відомим співвідношенням [3]:  $U(a, b, x) = x^{1-b}M(1 + a - b, 2 - b, x)$ . У позначеннях застосовуємо приведенний радіус нанокуюлі в одиницях радіуса Бора:  $\eta = R/a_0$ . Параметр  $\xi$  є функцією радіуса нанокуюлі  $R$  і залежить від квантових чисел  $\{l, n_r\}$ . Цікаво зауважити, що у даній задачі, під час застосування вказаної наближеної процедури розв'язування задачі Штурма-Ліувілля, не виникає випадкового виродження енергетичних рівнів, що суттєво відрізняє її від випадку «чистого» кулонівського потенціалу чи просторового осцилятора.



Власні значення енергії знаходяться чисельним розв'язком цих рівнянь. Досліджено залежність спектра одноелектронної задачі від ефективного розміру квантової точки та інших параметрів модельного потенціалу. Обраний потенціал має ту перевагу, що дозволяє здійснювати неперервний перехід від його кулонівської частини до гармонічної, змінюючи лише величину радіуса нанокуюлі. Поряд на рисунку наведена залежність параметра  $\xi_{l, n_r}(\eta)$  від радіуса нанокуюлі  $\eta$ .

Для області значень параметра  $0 < \eta < 1$  енергетичний спектр є водневоподібним. При зростанні радіуса, енергетичні рівні зміщуються. Це зміщення є найсуттєвішим для станів  $s$ -симетрії. Із збільшенням радіуса, енергетичні рівні стають еквідистантними. Більше того, перший збуджений стан є  $p$ -симетрії, другий збуджений стан відповідає виродженим  $2s$  і  $3d$  станам. Таким чином, спектр водневої задачі переходить в спектр гармонічного осцилятора при зростанні радіуса нанокуюлі. Ці результати узгоджуються з розрахунками, отриманими у роботі [5] методом Хартрі-Фока для водневоподібного спектра іона  $Ne^{9+}$ .

Для дослідження збуджених станів побудовано радіальну густину розподілу імовірності положення електрона в стаціонарних станах  $\{n, l\}$ . Показано, що при збільшенні радіуса нанокуюлі, розміри електронної хмари збільшуються, тоді як енергія основного та збуджених станів зменшується. Також показано, що вплив розмірів та форми нанокуюлі особливо сильно позначається на положенні енергетичних рівнів при зростанні зарядового числа  $Z$ . Ці параметри потенціалу можуть слугувати керуючими параметрами для оптимізації енергетичної структури сферичної квантової точки з метою отримання реальних структур із наперед заданими фізико-хімічними властивостями.

У роботі проведено також оцінку енергії основного стану за теорією збурень у двох випадках: для точкової квантової точки, за нульове наближенням береться розв'язок водневої задачі та для безмежно протяжного осциляторного потенціалу, де збуренням вважається різниця між кулонівським та осциляторним потенціалом зовні нанокуюлі.

1. Reinmann S. M., Manninen M., Rev.Mod.Phys. 74, 1283 (2002).
2. Іваненко Д. Д., Пустовалов Г. Е. УФН, 61, 27 (1957).
3. Yong S. J., Mkrtchian V. E., Lee S. H. Physics Lett. A, 373, 976 (2009).
4. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям (Наука, Москва, 1979).
5. Szafran B. at all. Physica E, 18, 523 (2003).