

# КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОДНОМЕРНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

*Г. В. Шпатаковская\**

*Институт математического моделирования Российской академии наук  
125047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 24 августа 2005 г.

На примере описания свойств одномерной квантовой точки при нулевой температуре развит последовательно квазиклассический метод исследования, пригодный и для систем большей размерности в случае разделяющихся переменных. В модели Томаса–Ферми с биквадратичным потенциалом конфинмента вычисляются самосогласованный потенциал, пространственное распределение плотности и полная энергия электронов как функция числа частиц и эффективного заряда электронов. Используется скейлинг по числу частиц. Выводится условие квантования для уровней энергии. Приводится вывод аналитических выражений, по которым на основе модели Томаса–Ферми рассчитываются пространственные осцилляции плотности, градиентная и оболочечная поправки к полной энергии электронов. Исследуется зависимость оболочечных эффектов от константы взаимодействия. Проводится сравнение с точными расчетами методом функционала плотности. Обсуждается связь полученных результатов с поправкой Струтинского.

PACS: 73.23.Nk, 05.45.Mt, 71.10.Ca, 71.15.Mb

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Квазиклассическое приближение — эффективный способ описания свойств нанообъектов (кластеров, квантовых точек, нанопроводников и т. д.). Эти системы содержат достаточно большое число частиц и могут быть исследованы методами классической физики, однако проявляют и квантовые свойства, которые, как оказалось, наглядно объясняются в квазиклассическом приближении на языке классических траекторий движения электрона в соответствующем потенциале (см., например, монографию [1]).

В данной работе в квазиклассическом приближении рассчитываются локальные характеристики (плотность, самосогласованный потенциал) и полная энергия электронов в квантовой точке — маленьком проводящем сгустке электронов в ограничивающем потенциале. На примере одномерного исследования предложен эффективный алгоритм расчета свойств не только одномерной системы, но и систем более высокой размерности с разделяющи-

мися переменными, в которых можно явно выписать условия квантования. Этот алгоритм отличается от квазиклассического подхода, описанного в обзоре [1], и основан не на плотности уровней  $g(E)$ , а на интегральной от нее величине — числе состояний  $N(\mu) = \int^\mu g(E) dE$ . Предлагаемый метод отличается и от метода Струтинского [1–3], в котором зависимость характеристик системы от числа частиц представляется в виде суммы основной, плавной, составляющей и поправочной, осциллирующей.

В нашей работе главная часть характеристик системы описывается в рамках модели Томаса–Ферми. Остальные эффекты учитываются в виде аддитивных поправок, рассчитываемых на ее основе аналитически, в отличие от метода Струтинского, в котором для этой цели приходится решать одночастичные уравнения Шредингера. Подобный подход частично использовался нами для расчета квазиклассического уравнения состояния вещества [4–7], для исследования свойств металлических кластеров и других электрон-ионных комплексов [8–10].

Рассматриваемый одномерный пример (см. [11]) соответствует трехмерной системе, инвариантной в

\*E-mail: shpat@imamod.ru

поперечных направлениях  $y$  и  $z$ . Хотя этот пример и не имеет самостоятельного значения, он хорошо иллюстрирует предлагаемый квазиклассический метод.

Далее в разд. 2 рассматривается модель Томаса–Ферми одномерной квантовой точки с биквадратичным потенциалом конфайнмента, в разд. 3 приводится вывод выражений модели Томаса–Ферми и поправок к ней на основе квазиклассического приближения в теории функционала плотности Кона–Шэма, в разд. 4 выводится условие квантования для уровней энергии в самосогласованном потенциале квантовой точки, разд. 5 и 6 посвящены выводу аналитических выражений для градиентных, осцилляционных, оболочечных поправок к плотности и полной энергии. В разд. 7 обсуждаются результаты расчетов. В Заключение мы кратко описываем проведенное исследование и обсуждаем возможное применение предложенного алгоритма для расчета характеристик реальных систем.

## 2. ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ТОМАСА – ФЕРМИ

При выполнении условия квазиклассичности

$$\xi = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{\hbar}{PL} \ll 1$$

( $\lambda = h/p$  — длина волны де Бройля,  $P$  — характерный импульс,  $L$  — характерная длина неоднородности) функция распределения  $N$  взаимодействующих частиц во внешнем потенциале  $V_{ext}(x)$  приближенно описывается моделью Томаса–Ферми<sup>1)</sup> [12]

$$f(x, p) = \theta(p_\mu^2(x) - p^2), \quad p_\mu^2(x) = 2m(\mu - V(x)). \quad (1)$$

Здесь  $\theta(x)$  — ступенчатая функция Хэвисайда,  $\mu$  — химический,  $V(x) = V_{ext} + V_{int}$  — самосогласованный потенциалы,  $V_{int}(x)$  — потенциал взаимодействия электронов, удовлетворяющий уравнению Пуассона:

$$V_{int}''(x) = -4\pi e^2 n(x),$$

т. е.

$$V_{int}[n(x)] = -2\pi e^2 \int_{-\infty}^{\infty} n(y)|x - y| dy, \quad (2)$$

<sup>1)</sup> В одномерном случае параметр квазиклассичности обратно пропорционален числу электронов в системе,  $\xi \propto N^{-1}$ , в двумерном  $\xi \propto N^{-1/2}$ , в трехмерном  $\xi \propto N^{-1/3}$ .

$e$  — эффективный заряд электронов, штрих здесь и ниже означает дифференцирование по  $x$ . Отсюда для электронной плотности  $n(x)$  и плотности кинетической энергии частиц  $t(x)$  имеем (спин не учитывается)

$$n(x) = n^{TF}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, p) dp = \frac{p_\mu(x)}{\pi\hbar}, \quad (3)$$

$$t(x) = t^{TF}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} f(x, p) dp = \frac{\hbar^2}{6m} \pi^2 n^3(x). \quad (4)$$

Химический потенциал определяется из условия нормировки на число частиц

$$\int_{-\infty}^{\infty} n(x) dx = N. \quad (5)$$

Полная энергия электронов в рассматриваемой модели равна

$$E^{TF} = \int_{-\infty}^{\infty} n(x) \times \left[ \frac{\hbar^2}{6m} \pi^2 n^2(x) + V_{ext}(x) + \frac{1}{2} V_{int}(x) \right] dx. \quad (6)$$

Возводя в квадрат выражение (3), дифференцируя затем дважды по  $x$  и используя уравнение Пуассона, получаем дифференциальное уравнение Томаса–Ферми для плотности в одномерном случае:

$$\pi^2 \frac{\hbar^2}{2m} [n^2(x)]'' - 4\pi e^2 n(x) + V_{ext}''(x) = 0, \quad (7)$$

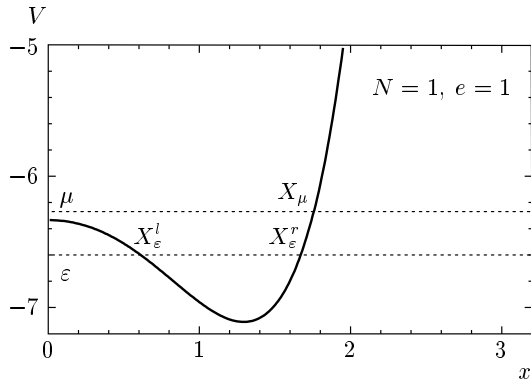
которое должно решаться с учетом условия нормировки (5).

До этого момента мы не конкретизировали вид внешнего потенциала  $V_{ext}(x)$ , т. е. приведенные выше выражения относятся к любой одномерной системе взаимодействующих по закону (2) частиц. Ниже мы будем рассматривать одномерную квантовую точку с биквадратичным ограничивающим потенциалом

$$V_{ext}(x) = gx^4.$$

В этом случае в уравнении (7)

$$V_{ext}''(x) = 12gx^2,$$



**Рис. 1.** Самосогласованный потенциал  $V(x) = V(-x)$  в квантовой точке. Расчет по модели Томаса–Ферми для заряда  $e = 1$  и числа электронов  $N = 1$  — жирная линия. Пунктирные линии: химический потенциал  $\mu$  и уровень энергии  $\varepsilon$ ;  $X_\varepsilon^l$ ,  $X_\varepsilon^r$  — левая и правая точки поворота,  $X_\mu$  — правая точка поворота для энергии, равной химическому потенциалу  $\mu$

а граничные условия соответствуют нулевой плотности на бесконечности и симметричному поведению ее в нуле:

$$n'(0) = 0.$$

Легко показать, что только для биквадратичного внешнего потенциала уравнение (7) с условием нормировки (5) обладает свойством подобия (скейлинга) по числу частиц  $N$ . Замена

$$\begin{aligned} x_N &= x_1 N^{1/3}, & n_N(x) &= n_1(x_1) N^{2/3}, \\ \mu_N &= \mu_1 N^{4/3}, \\ V_N &= V_1 N^{4/3}, & E_N &= E_1 N^{7/3} \end{aligned} \quad (8)$$

приводит к уравнению вида (7) для функции  $n_1(x_1)$  с условием нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} n_1(x_1) dx_1 = 1. \quad (9)$$

Здесь и далее мы опускаем индекс «TF». Таким образом, достаточно решить задачу только для  $N = 1$ . Учитывая симметрию, находим решение уравнения (7) при  $x \geq 0$  численно, итерациями по нелинейности так, чтобы условие нормировки (9) выполнялось с требуемой точностью (для дальнейшего сравнения с имеющимися в литературе данными всюду в расчетах полагаем  $g = 0.5$ ,  $m = \hbar = 1$ , а  $e$  измеряем в единицах электронного заряда).

Результаты вычислений для значения параметра  $e = 1$  показывают (рис. 1), что самосогласован-

ный потенциал  $V_1(x)$  имеет вид симметричной относительно нуля двойной ямы, разделенной барьером, причем химический потенциал  $\mu_1$  расположен вблизи «горба» этого барьера.

По функции  $n_1(x_1)$  электронную плотность и другие характеристики квантовой точки с любым числом частиц  $N$  восстанавливаем с помощью масштабного преобразования (8).

Для расчета энергии  $E_1$  удобно использовать выражение

$$E_1 = \frac{1}{2} \left[ \mu_1 + \int_0^{X_\mu} n_1(x_1) \left( x_1^4 - \frac{\pi^2 n_1^2(x)}{3} \right) dx_1 \right], \quad (10)$$

которое легко получается из формулы (6) с учетом симметрии задачи и соотношения (3). Здесь  $X_\mu$  — правая точка поворота:  $p_\mu(X_\mu) = 0$  (см. рис. 1).

В теории проводимости квантовой точки [13] важную роль играет величина изменения полной энергии электронов при добавлении в систему одного электрона, т. е. химический потенциал, а также производная от этой величины по числу частиц. В данном случае соответствующее дифференцирование проводится аналитически, исходя из скейлинга (8):

$$\begin{aligned} \mu(N) &= \frac{\partial E(N)}{\partial N} = \frac{7}{3} E_1 N^{4/3}, \\ \chi(N) &= \frac{\partial \mu(N)}{\partial N} = \frac{4}{3} \mu_1 N^{1/3}. \end{aligned}$$

Отметим, что при выполнении соотношений (8) нет нужды в расчете интеграла энергии (10). Коль скоро известно решение уравнения (7), а значит и величина  $\mu_1$ , из скейлинга (8) следует, что

$$E_1 = \frac{3}{7} \mu_1, \quad \chi_1 = \frac{4}{3} \mu_1. \quad (11)$$

Для  $e = 1$  расчет дает  $\mu_1 = -6.27$ .

В уравнение (7) в качестве параметра входит эффективный заряд электронов  $e$ . Представляет интерес исследовать зависимость энергии  $E_1$  и других физических характеристик от этого параметра. На рис. 2 зависимость электронной плотности  $n_1(x_1; e)$  от координаты представлена для нескольких значений  $e$ . Видно, что чем больше параметр взаимодействия, тем больше электронов выталкивается из центральной области квантовой точки.

Согласно расчетам по модели Томаса–Ферми, зависимость химического потенциала  $\mu_1(e)$  и соответственно величин  $E_1(e)$  и  $\chi_1(e)$  (см. (11)) от параметра  $e$  в диапазоне  $0.75 \leq e \leq 3$  хорошо описывается следующим выражением:

$$\ln \mu_1(e) = 0.26 e^3 - 2.00 e^2 + 6.19 e - 2.66.$$

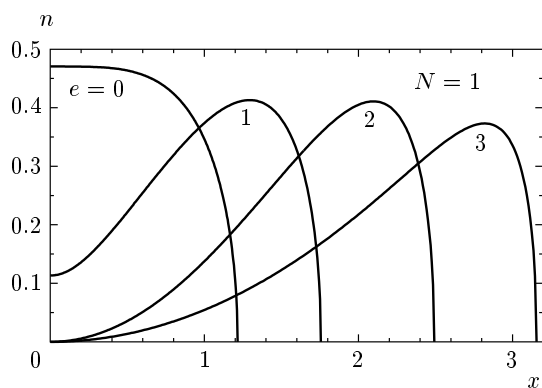


Рис. 2. Пространственное распределение электронной плотности  $n(x) = n(-x)$  в одномерной квантовой точке. Результаты расчетов по модели Томаса – Ферми для числа электронов  $N = 1$  и различных значений параметра взаимодействия (заряда электронов)  $e = 0, 1, 2, 3$

Сравнение с точными потенциалом и плотностью, рассчитанными по методу Кона – Шэма в теории функционала плотности, показывает, что самосогласованный потенциал Томаса – Ферми практически совпадает с точным, плотность же описывается в модели Томаса – Ферми усредненно, без учета пространственных осцилляций. В полной энергии модель Томаса – Ферми не описывает градиентные и оболочечные эффекты. Алгоритм введения этих эффектов в модель Томаса – Ферми предлагается ниже.

### 3. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Применим иной способ вывода выражений модели Томаса – Ферми, который позволит получить также формулы для поправок к ней следующего порядка по параметру квазиклассичности. Этот способ основан на квазиклассическом рассмотрении подхода Кона – Шэма в теории функционала плотности [14].

В общем случае исходный функционал энергии в одномерной задаче для  $N$  взаимодействующих электронов во внешнем потенциале  $V_{ext}(x)$  без учета об-

менно-корреляционных эффектов имеет вид

$$E[n] = T[n] + \int_{-\infty}^{\infty} V_{ext}(x)n(x) dx + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} V_{int}(x)n(x) dx. \quad (12)$$

Приближение Кона – Шэма для плотности и кинетической энергии электронов

$$n(x) = \sum_{k=1}^N |\psi_k(x)|^2, \quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_k(x)|^2 dx = 1, \quad (13)$$

$$T[n] = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} |\psi_k(x)|^2 dx \quad (14)$$

приводит к следующим уравнениям для одночастичных функций:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_k(x) = \epsilon_k \psi_k(x). \quad (15)$$

Будем решать их для рассматриваемой квантовой точки с потенциалом Томаса – Ферми в квазиклассическом приближении. Преобразование  $\psi(x) = e^{i\sigma(x)/\hbar}$  и разложение  $\sigma(x)$  по степеням  $\hbar/i$  (см., например, [15]) приводит к следующему выражению для нормированной на единицу волновой функции:

$$\psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\{-\hbar^2 \sigma_3 + \dots\} \times \cos\left(\frac{S(X^l, x)}{\hbar} - \alpha^l + \dots\right)$$

Здесь

$$S(X^l, x) = \int_{X^l}^x p(y) dy, \quad \sigma_3(x) = \frac{mV''}{8p^4} + \frac{5(mV')^2}{16p^6},$$

$p^2 = p_x^2(x) = 2m(\epsilon - V(x))$ ,  $X^l$  – левая точка поворота,  $\alpha^l$  – фаза, зависящая от поведения потенциала в окрестности точки поворота  $X^l$  (для линейного поведения  $\alpha^l = \pi/4$ ), многоточие обозначает члены более высокого порядка по  $\hbar$ .

Соответственно для плотности имеем

$$n(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{|C_k|^2}{p_k(x)} \exp\{-2\hbar^2 \sigma_3(k, x) + \dots\} \times \left[ 1 + \cos\left(\frac{2S_k(X^l, x)}{\hbar} - 2\alpha^l + \dots\right) \right], \quad (16)$$

$$p_k(x) \equiv p_{\epsilon_k}(x).$$

Полагая  $\hbar \rightarrow 0$ , получаем стандартное выражение для квазиклассической волновой функции:

$$\psi_k(x) = \frac{C_k}{\sqrt{p_k(x)}} \cos\left(\frac{S_k(X^l, x)}{\hbar} - \alpha^l\right). \quad (17)$$

Нормировочные коэффициенты  $|C_k|^2$  в главном приближении по параметру квазиклассичности  $\xi$  определяются из условия нормировки (13):

$$|C_k|^2 = 2 \left( \int_{X^l}^{X^r} \frac{dx}{p_k(x)} \right)^{-1} = 2m \left( \frac{dS_k^0}{d\epsilon_k} \right)^{-1}, \quad (18)$$

$$S_k^0 \equiv S_{\epsilon_k}^0 = \int_{X^l}^{X^r} p_k(x) dx.$$

Здесь  $X^r$  — правая точка поворота, которой соответствует фаза  $\alpha^r$ . Уровни энергии для потенциала  $V(x)$  рассмотренного выше вида определяются из условия квантования Бора–Зоммерфельда, вывод которого приводится ниже.

#### 4. УСЛОВИЕ КВАНТОВАНИЯ ДЛЯ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Стандартное выражение Бора–Зоммерфельда [15]

$$S_{\epsilon_k}^0 = \hbar(k\pi + \alpha^r + \alpha^l) \quad (19)$$

с  $\alpha^r = \alpha^l = \pi/4$  оказывается неприменимым при энергиях, близких к вершине барьера  $V(0)$  (см. рис. 1). Правильное условие квантования получаем, используя известное точное решение уравнения Шредингера (15) для квадратичного потенциала

$$V(x) = V(0) - \frac{|V''(0)|}{2} x^2, \quad V''(0) = -4\pi\epsilon^2 n(0) \quad (20)$$

и сшивая его асимптотики слева и справа с соответствующими квазиклассическими функциями. В результате приходим к исправленному условию квантования:

$$S_{\epsilon}^0/\hbar = (2k+1)\pi + \gamma_{\epsilon}^{\pm}, \quad (21)$$

$$S_{\epsilon}^0 \equiv S_{\epsilon}(-X_{\epsilon}, X_{\epsilon}) = 2S_{\epsilon}(0, X_{\epsilon}),$$

$$\gamma_{\epsilon}^{\pm} = \frac{d_{\epsilon}^2}{2} \left( 1 - \ln \frac{|d_{\epsilon}^2|}{2} \right) + \arg \Gamma \left( \frac{1 + id_{\epsilon}^2}{2} \right) \pm \left[ \frac{\pi}{4} + \arctg \left( \operatorname{th} \frac{\pi d_{\epsilon}^2}{4} \right) \right].$$

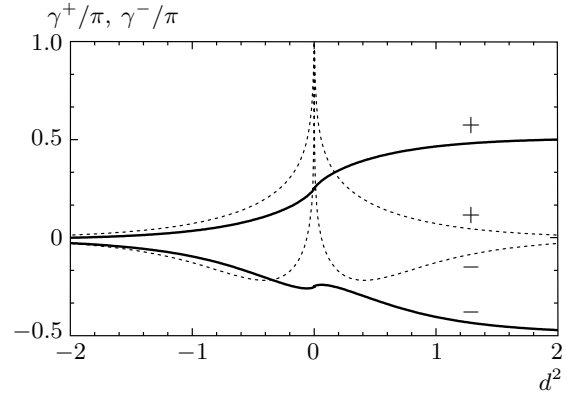


Рис. 3. Фазы  $\gamma_{\mu}^{\pm}$  из условия квантования (21) (жирные линии) и их производные  $d\gamma_{\mu}^{\pm}/dd^2$  (32) (пунктир) как функции параметра  $d^2$

Здесь  $S_{\epsilon}^0$  — классическое действие для движения электрона с энергией  $\epsilon$  между двумя точками поворота  $X^l = -X_{\epsilon}$  и  $X^r = +X_{\epsilon}$ ,  $\Gamma(z)$  — гамма-функция комплексного аргумента, величина

$$d_{\epsilon}^2 = \frac{p_{\epsilon}^2(0)}{\hbar \sqrt{4\pi m \epsilon^2 n(0)}} \quad (22)$$

характеризует близость энергии  $\epsilon$  к «горбу» потенциала  $V(0)$  (см. рис. 1). Заметим, что знак параметра  $d_{\epsilon}^2$  совпадает со знаком квадрата импульса  $p_{\epsilon}^2(0)$  и может быть как положительным, так и отрицательным соответственно в областях классически разрешенного и запрещенного движения частицы. Выражение (21) соответствует случаю, когда уровень энергии  $\epsilon$  расположен выше «горба» потенциала:  $\epsilon > V(0)$ ,  $d_{\epsilon}^2 > 0$ . В случае  $\epsilon < V(0)$ ,  $d_{\epsilon}^2 < 0$  в каждой из ям симметрично имеются по две точки поворота и в качестве  $S_{\epsilon}^0$  в (21) следует использовать иное выражение для действия:

$$S_{\epsilon}^0 = 2S_{\epsilon}(X_{\epsilon}^l, X_{\epsilon}^r),$$

где  $X_{\epsilon}^l, X_{\epsilon}^r$  — левая и правая точки поворота в правой яме (рис. 1).

Обратим внимание, что фазы  $\gamma^{\pm}$  зависят от энергии через параметр  $d_{\epsilon}^2$  (22) (рис. 3). Именно за счет этой зависимости условие квантования (21) плавно соединяет два предельных случая: прозрачный барьер, когда частица движется гораздо выше горба ( $d_{\epsilon}^2 \rightarrow \infty$ ,  $\gamma_{\epsilon}^{\pm}/\pi \rightarrow \pm 1/2$ ), и непроницаемый барьер, когда частица «заперта» в одной из двух ям ( $d_{\epsilon}^2 \rightarrow -\infty$ ,  $\gamma_{\epsilon}^{\pm} \rightarrow 0$ ) и имеется двукратно вырожденный уровень.

### 5. ПОПРАВКИ К ПЛОТНОСТИ

Для нахождения следующих членов разложения по параметру квазиклассичности применим при переходе от суммы к интегралу в (16) формулу Пуассона. Используя выражения (18) и (21), получаем

$$\begin{aligned}
 n(x) \equiv n(x, \mu) &\approx \frac{m}{2\pi\hbar} \times \\
 &\times \sum_{a=\pm} \left\{ \int \frac{d\epsilon}{p_\epsilon(x)} + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \int \frac{d\epsilon}{p_\epsilon(x)} \cos [2\pi s k^a(\epsilon)] + \right. \\
 &+ \sum_{s=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\epsilon}{p_\epsilon(x)} \cos \left( \frac{2S_\epsilon(x)}{\hbar} - 2\alpha' \right) \times \\
 &\left. \times \cos [2\pi s k^a(\epsilon)] - 2\hbar^2 \int \frac{d\epsilon}{p_\epsilon(x)} \sigma_3(\epsilon, x) \right\} = \\
 &= n_{TF}(x) + \delta n_{sh}(x) + \delta n_{osc}(x) + \delta n_{qu}^{(2)}(x). \quad (23)
 \end{aligned}$$

Здесь функция  $k^a(\epsilon)$  выражается через действие  $S_\epsilon^0$  согласно условию квантования (21), непрерывно продолженному для нецелых  $k$ , и имеет две ветви  $a = +$  и  $a = -$ , соответствующие  $\gamma_\epsilon^\pm$ . В выражении (23) первое слагаемое — это плотность по модели Томаса–Ферми (3), второе слагаемое описывает влияние дискретности спектра электронов — оболочечные эффекты. Третье слагаемое отражает волновые свойства электронов — осцилляционные эффекты. Из-за усреднения осциллирующих функций при интегрировании по  $\epsilon$  второй и третий члены имеют следующий порядок по  $\xi$  по сравнению со слагаемым (3).

Наконец, последний член — квантовая градиентная поправка — описывает вклад эффектов неоднородности потенциала и имеет квадратичный порядок по параметру квазиклассичности по сравнению с величиной (3).

Применяя последовательно квазиклассический подход, интегралы и суммы в (23) можно вычислить аналитически.

*Градиентные эффекты.* Прямое интегрирование по энергии дает выражение для градиентной поправки к плотности:

$$\delta n_{qu}^{(2)}(x) = \frac{\hbar}{8\pi p_\mu^5(x)} \left[ (mV')^2 + \frac{2}{3} p_\mu^2(x) mV''(x) \right]. \quad (24)$$

Используя скейлинг (8) и выделяя в формуле (24) зависимость от числа частиц:

$$\delta n_{qu}^{(2)}(x; N) = N^{-4/3} \delta n_{qu}^{(2)}(x; 1),$$

убеждаемся, что для градиентной поправки также справедливо свойство подобия, причем эта поправка

имеет порядок  $\xi^2 \propto N^{-2}$  по сравнению с плотностью в модели Томаса–Ферми.

*Осцилляционные эффекты.* Рассмотрим пространственные осцилляции плотности. Интегрируя по частям третий член в формуле (23), оставляем главное по параметру квазиклассичности внеинтегральное слагаемое и учитываем, что  $S_{\mu TF}^0/\pi\hbar = N$  — целое число. В результате получаем

$$\delta n_{osc}(x) \approx - \frac{m \cos \left[ \frac{2S_\mu(x)}{\hbar} \right]}{2p_\mu(x) T_\mu^0 \sin \left( \pi \frac{T_\mu(x)}{T_\mu^0} \right)}. \quad (25)$$

Здесь  $\mu = \mu_{TF}$ ,  $S_\mu(x)$ ,  $T_\mu(x) = dS_\mu(x)/d\mu$  — классические действие и время движения электрона с энергией  $\mu$  от левой точки поворота  $X^l = -X_\mu$  до точки  $x$ ,  $T_\mu^0 = T_\mu(X_\mu)$  — время движения между двумя точками поворота  $-X_\mu$  и  $+X_\mu$ ,  $X_\mu$  — правая точка поворота (см. рис. 1). Область применимости полученного выражения (25) исключает окрестности точек поворота.

Исследуя зависимость осцилляционной поправки (25) от числа частиц, покажем, что хотя осцилляционная поправка к плотности имеет более сложную зависимость от числа частиц, она также может быть рассчитана на основе решения задачи Томаса–Ферми с  $N = 1$ . Рассматривая отдельно амплитудный и фазовый множители:

$$\delta n_{osc}(x; N) = A(x; N) \cos[\phi(x; N)]$$

и применяя формулы (8), получаем

$$A(x; N) = A(x; 1) N^{-1/3}, \quad \phi(x; N) = \phi(x; 1) N.$$

Отсюда следует, что амплитуда осцилляций плотности имеет первый порядок малости по параметру квазиклассичности  $\xi$ , т.е. осцилляционные эффекты вносят более заметный вклад в плотность, чем градиентные эффекты.

Отметим, что при выводе формулы (25) мы не учитывали разницу состояний с  $a = +$  и  $a = -$ .

*Оболочечные эффекты.* Если проинтегрировать по пространству первые два члена в формуле (23) и учесть расщепление уровней согласно условию квантования (21), то получим ступенчатую функцию зависимости числа состояний от химического потенциала:

$$\begin{aligned}
 N(\mu) &= \frac{S_\mu^0}{\pi\hbar} + \frac{1}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s} \times \\
 &\times \left\{ \sin \left[ s \left( \frac{S_\mu^0}{\hbar} - \gamma_\mu^+ \right) \right] + \sin \left[ s \left( \frac{S_\mu^0}{\hbar} - \gamma_\mu^- \right) \right] \right\}, \quad (26)
 \end{aligned}$$

которая выражает тот факт, что при пересечении химическим потенциалом уровня энергии число состояний меняется дискретно на единицу. Из формулы (26) видно, что оболочечная поправка к числу состояний имеет первый порядок малости по параметру  $\xi$ , так как амплитуда осцилляций во втором члене не зависит от  $N$ , а первый, ТФ-член, пропорционален числу частиц.

## 6. ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ

Существенно, что вычисление всех обсуждаемых поправок в предположении их малости возможно на основе только характеристик модели Томаса–Ферми, а вклад каждой из них в энергию можно учитывать аддитивно, используя формулу [4]

$$\begin{aligned} \delta E &= - \int_{-\infty}^{\mu_{TF}} d\mu' \int \delta n(x, \mu') dx = \\ &= - \int_{-\infty}^{\mu_{TF}} \delta N(\mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (27)$$

Отметим, что вид, подобный (27), имеет и поправка Струтинского, описывающая оболочечные эффекты в ядре (см., например, формулу (4.183) из монографии [1]):

$$\delta E = \int_{-\infty}^{\mu} (\mu' - \mu) \delta g(\mu') d\mu', \quad (28)$$

где  $\delta g(\mu')$  — поправка к плотности уровней. В самом деле, интегрируя (28) по частям и учитывая связь плотности и числа уровней:

$$\delta N(\mu) = \int_{-\infty}^{\mu} \delta g(\mu') d\mu',$$

приходим к формуле (27). Однако, как было показано в работе [4], формула (27) (а значит и (28)) имеет более общий характер и может применяться к расчету не только оболочечных, но и любых малых поправок к модели Томаса–Ферми.

Исследуем теперь вклад обсуждаемых эффектов в энергию, используя выражение (27). Сразу отметим, что в силу усреднения при двойном интегрировании роль осцилляционных эффектов пренебрежимо мала, поэтому остановимся на градиентном и оболочечном слагаемых.

*Градиентные эффекты.* Выражение для градиентной поправки к энергии получается непосредственным интегрированием формулы (24) по  $\mu'$  и заменой импульса на плотность согласно формуле (3):

$$\delta E_{qu}^{(2)} = - \frac{\hbar^2}{12m} \int \left[ \frac{(n')^2}{2n} + n'' \right] dx. \quad (29)$$

Используя уравнение Томаса–Ферми (7) и скейлинг (8), выражение для конечной части  $\delta E_{qu}^{(2)}$  легко привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} \delta E_{qu}^{(2)}(N) &= \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^{X_\mu} \frac{x^2}{p_\mu(x)} dx - \frac{2}{3} e^2 X_\mu \right] = \\ &= \delta E_{qu}^{(2)}(1) N^{1/3}. \end{aligned} \quad (30)$$

Таким образом, градиентная поправка имеет порядок  $\xi^2 \propto N^{-2}$  относительно энергии в модели Томаса–Ферми.

*Оболочечные эффекты.* Формулу для оболочечной поправки к энергии получаем, подставляя второе слагаемое (26) в (27), интегрируя по частям и оставляя только основной внеинтегральный член<sup>2)</sup>. В результате имеем

$$\begin{aligned} \delta E_{sh} &= \frac{\hbar}{\pi} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{s^2} \times \\ &\times \left\{ \frac{\cos[s(S_\mu^0/\hbar - \gamma_\mu^+)]}{T_\mu^0 - \hbar \frac{d\gamma_\mu^+}{d\mu}} + \frac{\cos[s(S_\mu^0/\hbar - \gamma_\mu^-)]}{T_\mu^0 - \hbar \frac{d\gamma_\mu^-}{d\mu}} \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Фазы  $\gamma_\mu^\pm$  (21) и их производные

$$\begin{aligned} \frac{d\gamma_\mu^\pm}{d\mu} &= \frac{m}{\sqrt{4\pi e^2 n(0)}} \times \\ &\times \left[ \operatorname{Re} \psi \left( \frac{1 + id_\mu^2}{2} \right) - \ln \frac{|d_\mu^2|}{2} \pm \frac{\pi}{2 \operatorname{ch}(\pi d_\mu^2/2)} \right] \end{aligned} \quad (32)$$

определяют результат интерференции при сложении двух сумм. Здесь  $\psi(z)$  — пси-функция Эйлера,  $\psi(z) = d \ln \Gamma(z) / dz$ . Логарифмическая расходимость производных (32) при  $d_\mu^2 = 0$ , как будет показано ниже, существенно влияет на амплитуду оболочечных осцилляций.

Зависимость величины  $d_\mu^2$  от числа частиц определяем, используя выражения (22) и (8):

$$d_\mu^2(N) = d_\mu^2(1) N.$$

<sup>2)</sup> Это правомерно, если производная аргумента синуса в (26) не мала. Если это условие не выполняется, то формула (31) неприменима.

Поскольку фазы  $\gamma_\mu^\pm$  (21) и их производные — известные функции  $d_\mu^2$ , а для действия и времени также справедлив скейлинг:

$$S_\mu^0(N) = S_\mu^0(1) N, \quad T_\mu^0(N) = T_\mu^0(1) N^{-1/3},$$

оболочечная поправка к энергии (31) для любого числа частиц также может быть вычислена на основе одного расчета с  $N = 1$ . Амплитуда оболочечных осцилляций, как и градиентная поправка (30), имеет зависимость, пропорциональную  $N^{1/3}$  от числа частиц, т.е. порядка  $\xi^2$  относительно главного тоmas-фермиевского члена.

### 7. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Применим изложенный выше подход к расчету характеристик одномерной квантовой точки с  $N \geq 4$ . Мы будем сравнивать наши результаты с результатами работы [11], в которой для этой цели применялись метод функционала плотности Кона–Шэма [14] и метод Струтинского [1–3].

*Электронная плотность.* На рис. 4 представлены результаты расчетов электронной плотности в квантовой точке с константой взаимодействия  $e = 1$  по модели Томаса–Ферми с учетом и без учета осцилляционной поправки (25) для разных чисел электронов в сравнении с точным численным расчетом [11] по модели Кона–Шэма (13)–(15).

В квантовой точке с числом частиц  $N = 20$

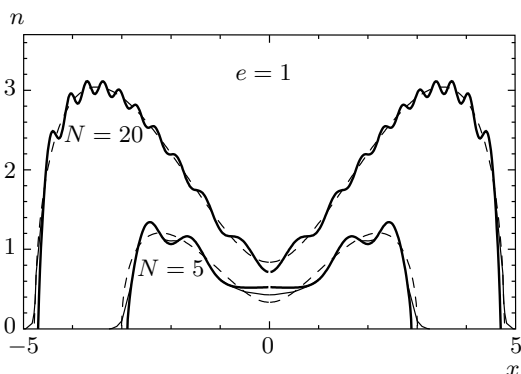


Рис. 4. Пространственное распределение электронной плотности  $n(x)$  в одномерной квантовой точке. Результаты расчетов по модели Томаса–Ферми без учета (штриховые линии) и с учетом (жирные линии) осцилляционной поправки (25) в сравнении с точным расчетом [11] методом функционала плотности (тонкие линии). Заряд электронов  $e = 1$ , число электронов  $N = 5$  (внизу),  $N = 20$  (вверху)

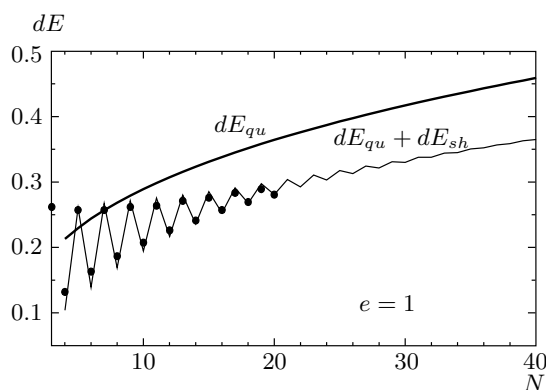


Рис. 5. Квантовая поправка  $dE_{qu}$  (30) к полной энергии электронов (жирная линия) и ее сумма с оболочечной поправкой  $dE_{sh}$  (31) (тонкая линия) как функции числа электронов  $N$  в квантовой точке. Жирные точки — разность между значениями полной энергии электронов, рассчитанными методом функционала плотности [11] и по модели Томаса–Ферми. Заряд электронов  $e = 1$

наши аналитические выражения всюду, кроме малых окрестностей точек поворота, дают практическое совпадение с квантовомеханическим расчетом. Для малого числа частиц  $N = 5$  квазиклассическое приближение, как и следовало ожидать, дает не столь хороший результат, хотя также неплохо описывает фазу и амплитуду осцилляций плотности.

Формула (25) с учетом условия нормировки позволяет оценить значение осцилляционной поправки в нуле в зависимости от числа частиц:

$$\delta n_{osc}(0) = -\frac{(-1)^N}{2p_\mu(0)T_\mu^0}.$$

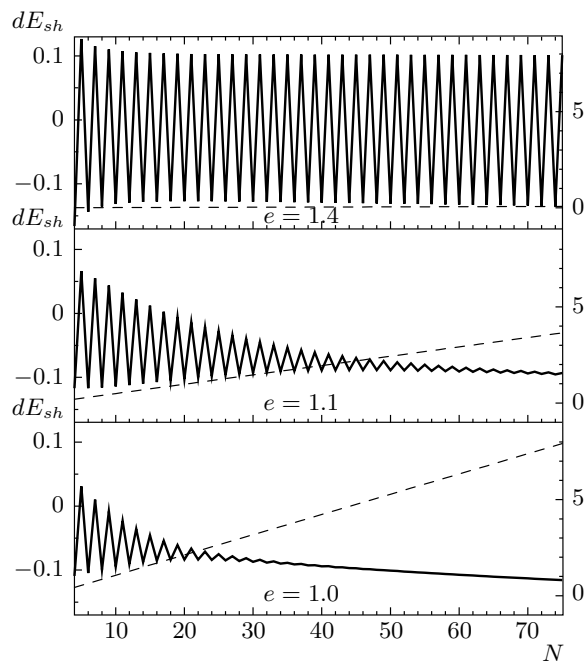
Отсюда видно, например, что добавление одного электрона в квантовую точку с нечетным числом электронов уменьшает электронную плотность в ее центре.

*Полная энергия электронов.* Результаты расчетов квантовой градиентной поправки к полной энергии по формуле (30) для  $e = 1$  соответствуют аналитической зависимости:

$$\delta E_{qu}^{(2)}(N) = 0.13 N^{1/3}$$

и представлены на рис. 5. На этом же рисунке мы приводим результаты расчета суммы градиентной и оболочечной (31) поправок в сравнении с взятой из работы [11] разницей между точным значением полной энергии, рассчитанной по модели Кона–Шэма (13)–(15), и той же величиной по модели





**Рис. 6.** Оболочечная поправка  $dE_{sh}$  (31) (сплошные линии, левая шкала) и параметр  $d_\mu^2$  (22) (штриховые линии, правая шкала) как функции числа электронов  $N$  в квантовой точке при различных значениях заряда электронов

Томаса–Ферми. Как показано в работе [11], эта разница практически совпадает с главной поправкой Струтинского. Таким образом, поправка Струтинского, для расчета которой в работе [11] численно решалось уравнение Шредингера (15) с потенциалом Томаса–Ферми, может быть вычислена аналитически как сумма оболочечной (31) и градиентной (30) поправок. Из выражений для этих поправок можно определить период и амплитуду осцилляций и исследовать их зависимость от константы взаимодействия (заряда электрона)  $e$ .

На рис. 6 приводятся результаты расчета оболочечной поправки (31) как функции числа электронов в квантовой точке для различных значений заряда электронов  $e$ . На том же рисунке представлены соответствующие зависимости  $d_\mu^2(N)$ . На рисунке видно, что с ростом параметра взаимодействия частиц  $e$  амплитуда осцилляций увеличивается и держится постоянной для все больших чисел  $N$ . Такое же увеличение и постоянство амплитуды осцилляций в диапазоне  $N = 2–20$  было получено и в численном точном расчете [11] для заряда электронов  $e = 1.5$ . Наш метод позволяет объяснить закон этого роста. Как следует из выражения (31), он определя-

ется фазами  $\gamma_\mu^\pm$  (21) и их производными (32), которые зависят от величины  $d_\mu^2$  (22), характеризующей близость химического потенциала системы к центральному максимуму самосогласованного потенциала  $V(0)$  (рис. 1). Функция же  $d_\mu^2(e)$  с ростом  $e$  очень быстро стремится к нулю, т.е. в область логарифмической особенности производных (32) (рис. 2), с которой и связано существенное изменение вида оболочечных осцилляций.

### 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе на примере квантовой точки был продемонстрирован квазиклассический способ описания одномерной системы взаимодействующих электронов.

Сначала свойства квантовой точки, их зависимость от числа частиц  $N$  и параметра взаимодействия (заряда электронов  $e$ ) были детально исследованы с помощью модели Томаса–Ферми. Было показано, что в рассмотренном случае биквадратичного потенциала конфайнмента задача Томаса–Ферми допускает масштабное преобразование по числу частиц (скейлинг), т.е. достаточно провести только один расчет с  $N = 1$ , а по нему результаты для любого числа частиц получаются просто изменением масштаба. В этом случае легко получается связь между физически важными в теории проводимости квантовой точки величинами.

Чтобы обобщить модель Томаса–Ферми и ввести в нее осцилляционные, оболочечные и градиентные эффекты, при решении одночастичных уравнений Кона–Шэма с потенциалом Томаса–Ферми было использовано квазиклассическое приближение и проведено разложение пространственной электронной плотности по параметру квазиклассичности. Главный член этого разложения – томас-фермиевский, следующие три члена описывают соответственно оболочечные, осцилляционные и градиентные эффекты. Для адекватного описания оболочечных эффектов было выведено условие квантования уровней энергии электронов в рассматриваемой системе и исследована его зависимость от числа частиц в квантовой точке и от параметра их взаимодействия. Показано, что если в модели Томаса–Ферми имеется скейлинг, то его можно применить и к расчету поправок.

Проведенное сравнение наших результатов с имеющимися в литературе точными квантовомеханическими расчетами показало, что они практически совпадают, а используемые нами аналитические

выражения позволяют объяснять эффекты, полученные в этих численных расчетах. Таким образом, имея дальнейшей целью описание реальных систем, например, симметричных двумерных квантовых точек, для которых в литературе используются более сложные методы [16–18], мы на рассмотренном примере показали эффективность нашего квазиклассического метода. Мы подробно описали алгоритм его применения и продемонстрировали, что по сравнению с общими методами, описанными в обзоре [1], для пространственно-симметричных систем наши гораздо более простые выражения не только позволяют решить задачу до конца с хорошими количественными результатами, но и дают возможность их детального анализа и прозрачной физической интерпретации.

Автор выражает признательность О. Илиеву, а также благодарит В. Я. Карпову за помощь в численных расчетах.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты №№ 03-01-00438, 05-01-00631) и Министерства образования и науки РФ (грант НШ-2060.2003.2).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. Brack and R. K. Bhaduri, *Semiclassical Physics*, Addison-Wesley, Reading MA (1997).
2. V. M. Strutinsky, *Nucl. Phys.* **A122**, 1 (1968).
3. M. Brack, J. Damgaard, A. S. Jensen, H. C. Pauli, V. M. Strutinsky, and C. Y. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 320 (1972).
4. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпатаковская, *УФН* **111**, 3 (1975).
5. Г. В. Шпатаковская, *ТВТ* **23**, 42 (1985).
6. E. A. Kuz'menkov and G. V. Shpatakovskaya, *Int. J. Thermophys.* **13**, 315 (1992).
7. Д. А. Киржниц, Г. В. Шпатаковская, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Препринт № 33, Москва (1998).
8. Г. В. Шпатаковская, *Письма в ЖЭТФ* **70**, 333 (1999); E-prints archives, cond-mat/0001116.
9. Г. В. Шпатаковская, *ЖЭТФ* **118**, 87 (2000).
10. Г. В. Шпатаковская, *Письма в ЖЭТФ* **73**, 306 (2001).
11. D. Ullmo, T. Nagano, S. Tomsovic, and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **63**, 125339 (2001).
12. Д. А. Киржниц, *Полевые методы теории многих частиц*, Госатомиздат, Москва (1963).
13. C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **44**, 1646 (1991).
14. *Теория неоднородного электронного газа*, Мир, Москва (1987).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
16. A. Puente, M. Casas, and Ll. Serra, *Physica E* **8**, 387 (2000).
17. Ll. Serra and A. Puente, *Eur. Phys. J.* **14**, 77 (2001).
18. D. Ullmo, H. Jiang, W. Yang, and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **70**, 205309 (2004).