

Одномерные и квазиодномерные электронные системы в наноканалах

Т.И. Зуева, Ю.З. Ковдря, С.С. Соколов

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: zueva@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 24 июня 2005 г., после переработки 7 июля 2005 г.

Исследован энергетический спектр электронов, локализованных в цилиндрических наноканалах, покрытых толстым слоем твердого водорода или неона. Определен потенциал взаимодействия электрона с окружающим веществом. Разработан алгоритм решения волнового уравнения, включающий аналитические и численные расчеты. Исследована зависимость энергии электрона от радиуса канала и определены волновые функции электрона. Рассмотрено влияние гелиевой пленки на энергетические состояния электрона. Показано, что при радиусах каналов порядка 50 \AA локализация электрона внутри канала энергетически выгодна.

Досліджено енергетичний спектр електронів, локалізованих в циліндричних наноканалах, покритих товстим шаром твердого водню або неону. Визначено потенціал взаємодії електрона з навколишньою речовиною. Розроблено алгоритм рішення хвильового рівняння, що включає аналітичні та чисельні розрахунки. Досліджено залежність енергії електрона від радіуса каналу та визначено хвильові функції електрона. Розглянуто вплив гелієвої плівки на енергетичні стани електронів. Показано, що при радіусах каналів порядку 50 \AA локалізація електрона усередині каналу є енергетично вигідною.

PACS: 67.40.Jg, 73.20.Dx, 73.20.Fz

Ключевые слова: наноканалы, системы пониженной размерности, квазиодномерные электронные системы

1. Введение

В последнее время большое внимание уделяется теоретическому и экспериментальному исследованию наносистем различной физической природы. Их изучение имеет как фундаментальное, так и прикладное значение, поскольку многие из этих систем можно использовать для создания чувствительных электронных устройств. В настоящее время обсуждается возможность использования разного рода наносистем (в частности, квантовых точек) для создания битов для квантовых компьютеров.

Среди систем пониженной размерности важную роль играют квазиодномерные и одномерные рядовые системы. Такие системы реализуются в тонких проводящих проволочках и полупроводниковых структурах с узким полевым затвором. Недавно была получена новая одномерная система

высокого качества — проводящие углеродные нанотрубки.

Наряду с указанными низкоразмерными системами в работе [1] была предложена, а в работе [2] успешно реализована квазиодномерная электронная система с использованием электронов, локализованных над поверхностью жидкого гелия (поверхностных электронов). Поверхностные электроны формируют очень чистую гомогенную низкоразмерную систему, характеризующуюся высокой подвижностью и сильным электрон-электронным взаимодействием, наличие которого для двумерного электронного слоя приводит к фазовому переходу в кристаллическое состояние. Экспериментально квазиодномерная электронная система над жидким гелием в широкой области плотностей электронов была подробно изучена в [3]; в работе [4] теоретически рассмотрены кинетические свойства электронов в такой системе. Было

установлено, что при относительно высоких температурах ($T > 0,9$ К) кинетические характеристики электронов в основном определяются их столкновениями с атомами гелия в паре, а при $T < 0,9$ К основную роль в процессах рассеяния играют риплоны. Было также выяснено, что в квазиодномерных системах важную роль играют эффекты локализации носителей, обусловленные либо взаимодействием электронов с атомами гелия в паре при высоких температурах, либо их рассеянием на случайном потенциале, возникающем вследствие шероховатости подложки, на которой формируется проводящий канал. Как в случае двумерных электронных слоев, так и электронов в одномерных и квазиодномерных системах, большой интерес представляет проблема упорядочения зарядов. Процессы упорядочения в одномерных и квазиодномерных проводящих каналах с параболическим удерживающим потенциалом, использованным в работах [2,3], изучены в [5]. Было показано, что температура упорядочения в этом случае меньше, чем для двумерного электронного слоя, и является сложной периодической функцией электронной плотности.

Низкоразмерная электронная система, рассмотренная в [1], обладает некоторыми специфическими особенностями. Одна из них состоит в том, что при большой концентрации зарядов распределение электронной плотности поперек канала неоднородно.

В последнее время интенсивно развивается технология получения диэлектрических каналов малого диаметра. Наиболее совершенные цилиндрические каналы получаются в ядерных фильтрах из поликарбонатного материала, причем диаметр каналов может изменяться в весьма широких пределах: от $3 \cdot 10^{-6}$ до $2 \cdot 10^{-5}$ см и больше [6,7]. Естественно поставить вопрос, можно ли с помощью таких каналов реализовать одномерные и квазиодномерные системы электронов.

Если в цилиндрических каналах малого диаметра адсорбировать пленку вещества, которое обладает конечным потенциальным барьером, препятствующим проникновению в него электронов (He, H₂, Ne), то реализация одномерных и квазиодномерных систем зарядов в таких каналах оказывается возможной. Цель настоящей работы — исследование энергетического спектра электронов на примере идеализированных цилиндрических каналов в твердом водороде и неоне. Рассматривается ситуация значительной толщины покрытия, при которой влиянием вещества стенок можно пренебречь. Изучен также спектр в каналах разного диаметра, образованных в твердых водороде и неоне, стенки которых покрыты гелиевой пленкой различной толщины.

2. Основные соотношения

Изучая движение электрона внутри тонкой трубки, рассмотрим два случая:

1) электрон находится в цилиндрическом канале радиусом $r = R_1$;

2) стенки канала покрыты гелиевой пленкой; в этом случае имеем два характерных размера: радиус полости $r = R_1$, в которой находится электрон, и радиус канала в твердом диэлектрике $r = R_2 = R_1 + d$, где d — толщина гелиевой пленки (см. рис. 1).

Будем считать длину цилиндрического канала бесконечной. Учитывая круговую симметрию задачи, а также тот факт, что вдоль оси канала (ось z) электрон движется свободно, энергию электрона и его волновую функцию запишем в виде

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} + E_r; \quad (1)$$

$$\psi(r, \theta, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ik_z z \pm in\theta) \varphi_n(r), \quad (2)$$

где m_e — масса электрона, E_r — энергия, отвечающая радиальному и азимутальному движениям, k_z — волновое число, а $n = 0, 1, 2, \dots$. Функции $\varphi_n(r)$ и допустимые значения $E_r^{(n)}$ энергии E_r будем определять из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \varphi_n(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi_n(r)}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \varphi_n(r) \right] = [E_r^{(n)} - U(r)] \varphi_n(r). \quad (3)$$

Функция $\varphi_n(r)$ должна удовлетворять граничному условию $\varphi_n(R_1) = 0$, что соответствует прибли-

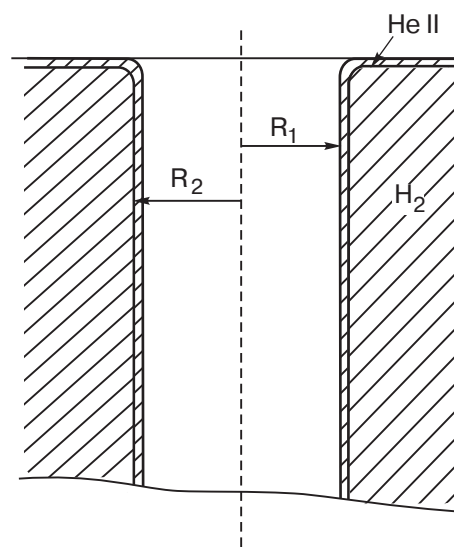


Рис. 1. Схематический вид канала для реализации одномерной электронной системы.

жению бесконечного значения высоты потенциального барьера V_0 , расположенного при $r = R_1$ и препятствующего проникновению электрона в глубь жидкого гелия или твердых водорода и неона. Характерная высота потенциального барьера для этих веществ составляет $V_0 \sim 1$ эВ.

Решение уравнения (3) зависит от потенциальной энергии $U(r)$ взаимодействия электрона с веществом стенок канала. В общем случае эту энергию следует определять с помощью решения уравнения Пуассона для потенциала электростатического поля, создаваемого в окружающей среде электроном, расположенным в точке пространства с координатами $\{r, z\}$ [8]. К сожалению, решить аналитически уравнение Пуассона в рассматриваемой геометрии в общем случае гелиевого покрытия стенок канала не представляется возможным. Для нахождения $U(r)$ можно использовать приближенный подход, в котором эта энергия вычисляется как сумма энергий взаимодействий электрона с индуцированными дипольными моментами атомов среды [9]. Энергия такого взаимодействия принимается равной $\kappa_i e^2 [2(r^2 + z^2)^2]$, где κ_i — поляризуемость атома, удаленного от электрона на расстояние $\sqrt{r^2 + z^2}$, e — заряд электрона. Как показано в [8], в случае вещества с диэлектрической постоянной ϵ_s , мало отличающейся от единицы (заметим, что жидкий гелий, твердые водород и неон удовлетворяют этому условию), данный подход приводит к тем же результатам, что и метод электростатических изображений для решения уравнения Пуассона. Учитывая цилиндрическую геометрию задачи и применяя схему вычислений, аналогичную использованной в работе [9], приходим к следующему выражению для энергии $U(r)$:

$$U(r) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{2\pi} d\theta' \int_{R_1}^{\infty} \frac{r' dr'}{[|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + (z - z')^2]^2} - \frac{\Lambda_1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{2\pi} d\theta' \int_{R_2}^{\infty} \frac{r' dr'}{[|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + (z - z')^2]^2}, \quad (4)$$

где

$$\Lambda_0 = \frac{\pi n_1 \kappa_1 e^2}{2} = \frac{e^2}{4} \frac{\epsilon_{\text{He}} - 1}{\epsilon_{\text{He}} + 1};$$

$$\Lambda_1 = \frac{\pi(n_2 \kappa_2 - n_1 \kappa_1) e^2}{2} = \frac{e^2 \epsilon_{\text{He}} (\epsilon_s - \epsilon_{\text{He}})}{(\epsilon_{\text{He}} + 1)^2 (\epsilon_s + \epsilon_{\text{He}})},$$

ϵ_{He} — диэлектрическая постоянная жидкого гелия, индексы 1 и 2 относятся соответственно к средам, расположенным в слое $R_1 < r < R_2$ (гелий) и при

$r > R_2$ (вещество стенки канала с диэлектрической постоянной ϵ_s); n_i — объемные концентрации атомов в этих средах. Вычисляя интегралы в (4), получаем

$$U(r) = -\frac{2\Lambda_0}{R_1} F\left(\frac{r}{R_1}\right) - \frac{2\Lambda_1}{R_2} F\left(\frac{r}{R_2}\right), \quad (5)$$

где

$$F(s) = \int_1^{\infty} \frac{tE(2\sqrt{ts}/(t+s)) dt}{(t+s)(t-s)^2},$$

$E(x)$ — полный эллиптический интеграл.

Выражение (5) все еще очень сложное, поскольку аналитически удается вычислить только асимптотические пределы $F(s)$. Так, при $s \rightarrow 0$, имеем $F(s) \simeq \pi/2$, а если $s \rightarrow 1$, то

$$F(s) \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-s} - \frac{1}{2} \ln(1-s) + 1,039 \right]. \quad (6)$$

Из приведенных асимптотических оценок следует, что если $R_2 \rightarrow \infty$, то второе слагаемое в (5) исчезает. Этот результат следует и из общего выражения (4). В случае, когда электрон движется в цилиндрическом канале без покрытия гелием его стенок, необходимо в Λ_0 , входящем в (4) и (5), заменить ϵ_{He} на ϵ_s .

В пределе $r \rightarrow R_1$ потенциальная энергия (5) переходит в

$$U(\xi) \simeq -\frac{\Lambda_0}{\xi} - \frac{\Lambda_1}{\xi + d}, \quad (7)$$

где введено обозначение $\xi = R_1 - r$. Выражение (7) совпадает с известным выражением для потенциальной энергии электрона, расположенного на расстоянии ξ от пленки гелия, находящейся на плоской твердой подложке [9].

Для решения уравнения (3) при произвольном значении $0 < r/R_1 < 1$ приведенных асимптотических оценок недостаточно. Поэтому были использованы следующие аппроксимирующие выражения для функции $F(s)$:

$$F_1(s) \simeq \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-s} - g_1 s(1-s) + g_2 \right]; \quad (8)$$

$$g_1 \simeq 0,9133144; \quad g_2 = \pi - 1;$$

$$F_2(s) \simeq \frac{1}{1-s^2} + \frac{\pi}{2} - 1. \quad (9)$$

Аппроксимации (8) и (9) дают верные асимптотические выражения $F(s)$ в пределе $s \rightarrow 0$. Если $s \rightarrow 1$, и $F_1(s)$, и $F_2(s)$ ведут себя как $(1/2)(1-s)^{-1}$. Функции $F_1(s)$ и $F_2(s)$ близки к точной функции $F(s)$ при всех $0 < s < 1$. На рис. 2 показаны потенци-

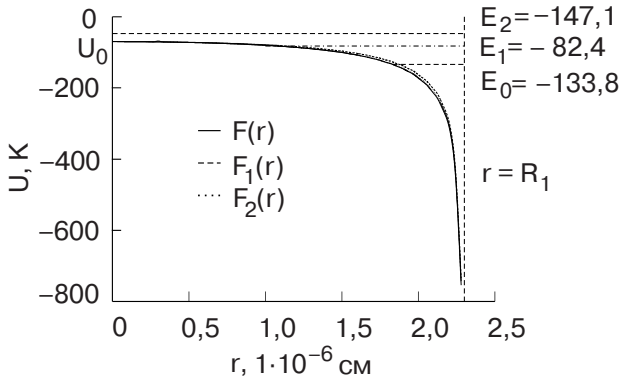


Рис. 2. Потенциал электрона в цилиндрическом канале из твердого водорода, покрытого гелиевой пленкой. $R_1 = 2,3 \cdot 10^{-6}$ см, $R_2 = 2,5 \cdot 10^{-6}$ см. Сплошная линия — точное выражение для потенциала (5). Аппроксимация (8) практически совпадает с кривой для точного потенциала. Горизонтальными линиями показаны уровни энергии при $n = 0$.

альные энергии $U(r)$, рассчитанные численно для каналов из твердого водорода, покрытого пленкой гелия, с использованием как полного интегрального представления $F(s)$, так и аппроксимаций (8) и (9). На рис. 2 видно, что различные аппроксимации практически совпадают с точным значением потенциала $U(r)$. Как показали дальнейшие исследования, использование выражений (8) и (9) приводит к близким собственным значениям энергии электрона $E_r^{(n)}$.

Следует отметить, что в отсутствие гелиевого покрытия уравнение Пуассона для потенциала электростатического поля электрона можно решить в предположении $\epsilon_s - 1 \ll 1$. В результате получается следующее приближенное выражение для силы изображения, действующей на электрон:

$$\mathcal{F}_r = \frac{4\Lambda_0 R r}{(R^2 - r^2)^2} = -\frac{\partial U}{\partial r}.$$

Вычисляя постоянную интегрирования из условия $U(0) = -\pi\Lambda_0/R_1$, получаем выражение для U_r , совпадающее с первым членом в выражении (5), где $F(s) \equiv F_2(s)$.

При проведении численных расчетов оказалось более удобным использовать аппроксимацию $F(s) \approx F_1(s)$.

3. Электрон в цилиндрическом канале без пленки гелия

В этом случае в потенциале (4) следует оставить только первое слагаемое. При решении уравнения (3) удобно ввести безразмерную переменную $\rho = r/R$, где $R = R_2$ — радиус канала в твердом водо-

роде или твердом неоне. Используя (8), перепишем (3) как

$$\rho^2 \varphi_n''(\rho) + \rho \varphi_n'(\rho) + \left[\frac{2m_e R \Lambda}{\hbar^2} \rho^2 \left(\frac{1}{1-\rho} - g_1 \rho (1-\rho) + g_2 \right) \right] \varphi_n + \frac{2m_e R^2}{\hbar^2} \rho^2 E_r^{(n)} \varphi_n - n^2 \varphi = 0, \quad (10)$$

где $\Lambda = (e^2/4)(\epsilon_s - 1)/(\epsilon_s + 1)$. Уравнение (10) следует решать с учетом граничного условия $\varphi_n(1) = 0$. Должно также выполняться естественное условие $|\varphi_n(0)| < \infty$ ограниченности решения при $\rho = 0$.

Приведем уравнение (10) к стандартному виду, не содержащему особенностей (см., например, [10]), умножив его на $1 - \rho$. Заметим, что логарифмическая особенность при умножении на $1 - \rho$ исчезает. Этим самым *a posteriori* оправдывается сохранение только степенной особенности в потенциале. Получаем

$$\rho^2(1-\rho)\varphi_n''(\rho) + \rho(1-\rho)\varphi_n'(\rho) + [-n^2 + n^2\rho + (B_2 + \lambda_n)\rho^2 - (B_3 + \lambda_n)\rho^3 + B_4\rho^4 - B_5\rho^5]\varphi_n = 0, \quad (11)$$

где

$$\lambda_n = \frac{2m_e R^2}{\hbar^2} E_r^{(n)}$$

— перенормированные собственные значения энергии, а коэффициенты $B_2 - B_5$ определяются как

$$B_2 = \frac{2m_e R \Lambda}{\hbar^2} (1 + g_2), \quad B_3 = \frac{2m_e R \Lambda}{\hbar^2} (g_1 + g_2), \\ B_4 = \frac{4m_e R \Lambda}{\hbar^2} g_1, \quad B_5 = \frac{2m_e R \Lambda}{\hbar^2} g_1.$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением $n = 0, 1, 2$ и при каждом значении n найдем последовательность собственных значений $\lambda_n^{(l)}$, $l = 1, 2, \dots$. Число l назовем *главным квантовым числом* задачи, поскольку оно нумерует последовательность энергетических уровней.

Ограниченное в нуле решение будем искать в виде ряда [10]

$$\varphi_n(\rho) = \rho^n \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k. \quad (12)$$

Подстановка этого разложения в уравнение (11) дает рекуррентную формулу для коэффициентов c_k . Поскольку полином при φ имеет степень 5, рекуррентная формула связывает k -й член с пятью предыдущими:

$$c_k = \frac{[2n(k-1) + (k-1)^2]c_{k-1} - (B_2 + \lambda_n)c_{k-2} + (B_3 + \lambda_n)c_{k-3} - B_4c_{k-4} + B_5c_{k-5}}{k(2n+k)},$$

$$c_{-1} = c_{-2} = 0, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = 0, \quad c_2 = -\frac{B_2 + \lambda_n}{4(n+1)}.$$

Коэффициенты c_k представляют собой полиномы степени $[k/2]$ относительно λ_n . Спектр $\lambda_n^{(l)}$ собственных значений λ_n получается из граничного условия $\varphi_n^{(l)}(1) = 0$, т.е. определяется при вычислении корней ряда

$$c_0 + c_1 + c_2 + \dots + c_k + \dots = 0. \quad (13)$$

Аналитически найти корни этого ряда не представляется возможным, однако, как показывают численные расчеты, корни конечных сумм ряда (13) представляют собой последовательность значений, которая с двух сторон быстро сходится к некоторому среднему значению. При достаточно большом числе членов ряда (мы использовали до 250 слагаемых в уравнении (13)) можно получить два-три десятичных знака для собственного значения энергии основного состояния $\lambda_n^{(1)}$, а также нескольких первых возбужденных состояний $\lambda_n^{(l)}$, $l > 1$.

Оказалось, что последовательность корней дискретна и всегда существует минимальный корень $\lambda_n = \lambda_n^{(1)}$, определяющий минимальное собственное значение энергии. Эта энергия при больших R оказывается меньше величины U_0 (значения потенциала на оси цилиндра), однако с уменьшением радиуса канала при некотором значении $R < 5 \cdot 10^{-7}$ см становится больше величины U_0 (рис. 2, пунктирная линия). При $R \rightarrow \infty$ потенциал принимает вид

$$U(\zeta) = -\frac{\Lambda}{R} \left[\frac{1}{\zeta} + g_2 \right],$$

$\zeta = 1 - \rho$ определяет расстояние электрона от твердой стенки, и мы получаем аналог *плоской задачи* [9] о спектре электрона над диэлектриком.

Поскольку с уменьшением радиуса канала потенциальная яма вблизи стенки становится очень узкой, электрон вытесняется из нее и оказывается локализованным в центре канала. Энергетический спектр электрона в этом случае должен быть близок к спектру в круговой потенциальной яме с плоским дном. Покажем, что уровни энергии, полученные для потенциала (4) и потенциальной ямы с плоским дном, имеют близкие значения.

Уравнение Шредингера с потенциалом $U = U_0$ для радиальной составляющей волновой функции принимает вид

$$\rho^2 \varphi_n'' + \rho \varphi_n' - [(U' - \lambda_n)\rho^2 + n^2] \varphi_n = 0,$$

где $U' = 2m_e^2 R U_0 / \hbar^2$. Поскольку электрон не может находиться ниже уровня ямы, то $\lambda_n > U'$, и мы приходим к уравнению Бесселя. Решениями являются функции Бесселя 1-го рода:

$$\varphi_n(\rho) = C J_n(\sqrt{\lambda_n - U'}\rho). \quad (14)$$

Собственные значения получаются из граничного условия $\varphi_n(1) = 0$, т.е. представляют собой нули функции Бесселя, смещенные на U' : $\lambda_n^{(l)} = j_n^{(l)2} + U'$.

Полагая U_0 равным значению потенциала $U(\rho)$ при $\rho = 0$,

$$U_0 = -\frac{\Lambda}{R}(1 + g_2) - \frac{\pi\Lambda}{R},$$

сравним решение задачи для плоской потенциальной ямы с полученным решением для каналов малого радиуса. Как видно на рис. 3, графики функций $\varphi_n(1)$ как функции λ_n для этих задач действительно близки. Собственные значения λ_n , соответствующие основному состоянию, которые получены для точного потенциала и в приближении плоской потенциальной ямы, отличаются примерно в 1,6 раза, а для возбужденных состояний различие уменьшается.

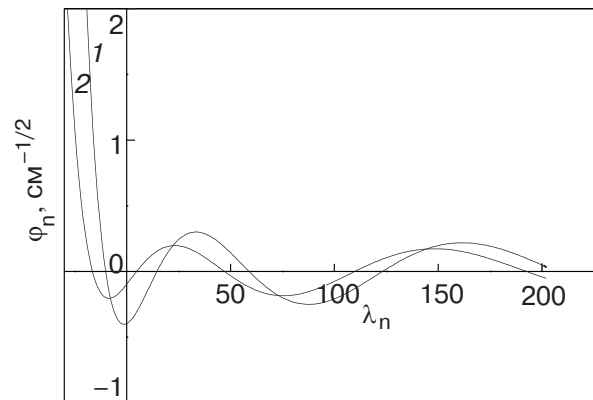


Рис. 3. Волновые функции электрона в канале из твердого неона радиусом $R = 5 \cdot 10^{-7}$ см как функции λ_n : кривая 2 — решение $\varphi_n(\rho) \equiv \varphi_n(\rho, \lambda_n)$ при $\rho = 1$ для потенциала $U(\rho)$; кривая 1 — функция Бесселя $J_0(\sqrt{\lambda_n - U'}\rho)$ при $\rho = 1$.

4. Спектр электронов в каналах, покрытых гелиевой пленкой

Потенциал $U(r)$ в этом случае имеет вид (5) с приближениями для $F(s)$ вида (8) или (9), что соответствует наличию двух веществ: твердого неона/водорода и жидкого гелия.

В этом разделе, как и в предыдущем, используем приближение (9). В безразмерных переменных $\rho = r/R_1$ потенциал $U(\rho)$ принимает вид

$$U(\rho) = -\frac{\Lambda_0}{R_1} \left[\frac{1}{1-\rho} - g_1 \rho(1-\rho) + g_2 \right] - \frac{\Lambda_1}{R_2} \left[\frac{1}{1-b\rho} - g_1 b \rho(1-b\rho) + g_2 \right] = -\frac{\Lambda_0}{R_1} F_1(\rho) - \frac{\Lambda_1}{R_2} F_1(b\rho), \quad (15)$$

где функция $F_1(s)$ определена соотношением (8) и $b = R_1/R_2$. Подстановка этого выражения в уравнение (3) для φ_n дает

$$\rho^2 \varphi_n''(\rho) + \rho \varphi_n'(\rho) + \left[\frac{2m_e R_1 \Lambda_0}{\hbar^2} \rho^2 F_1(\rho) + \frac{2m_e R_2 \Lambda_1}{\hbar^2} \rho^2 F_1(b\rho) + \frac{2m_e R_1^2}{\hbar^2} \rho^2 (E_n - \mu) - n^2 \right] \varphi_n = 0. \quad (16)$$

Поскольку функция $U(\rho)$ имеет две особенности, при $r = R_1$ и $r = R_2$ (что соответствует $\rho = 1$ и $\rho = R_2/R_1 = 1/b$ в переменных ρ), то для приведения уравнения к стандартному виду без особенностей нужно умножить его на $(1-\rho)$ и $(1-b\rho)$. В результате получаем

$$\rho^2(1-\rho)(1-b\rho)\varphi_n''(\rho) + \rho(1-\rho)(1-b\rho)\varphi_n'(\rho) + P_6(\rho)\varphi_n = 0,$$

где коэффициент при φ_n — полином 6-й степени

$P_6(\rho) = -n^2 + n^2(b+1)\rho + (A_2 + \lambda_n)\rho^2 - [A_3 + \lambda_n(b+1)]\rho^4 + (A_4 + b\lambda_n)\rho^4 - A_5\rho^5 + A_6\rho^6$ с коэффициентами A_2-A_6 , аналогичными коэффициентам B_2-B_5 в уравнении (11). Эти коэффициенты определяются через параметры, входящие в потенциал, и по аналогии с (11) значения энергии переобозначены как

$$\lambda_n = \frac{2m_e R_1^2}{\hbar^2} E_r^{(n)}.$$

Подстановка решения в виде ряда (12) дает рекуррентные соотношения для коэффициентов, связывающие k -й член с шестью предыдущими:

$$c_k = -\frac{1}{k(k+2n)} \{ -(b+1)(k-1)(k-1+2n)c_{k-1} + [b(n+k-2)^2 + A_2 + \lambda_n]c_{k-2} - [A_3 + \lambda_n(b+1)]c_{k-3} + (A_4 + b\lambda_n)c_{k-4} - A_5c_{k-5} + A_6c_{k-6} \};$$

$$c_{-1} = c_{-2} = 0, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = 0, \quad c_2 = -\frac{A_2 + \lambda_n + n^2 b}{4 + 4n},$$

$$c_3 = -\frac{n^2(b+1) + (A_2 + \lambda_n)(b+1) - [A_3 + \lambda_n(b+1)]}{9 + 6n}.$$

Коэффициенты c_k представляют собой полиномы степени $[k/2]$ относительно λ_n . Собственные значения $\lambda_n^{(l)}$, как и в предыдущей задаче, определяются как корни ряда (12). Аналитически найти корни этого ряда невозможно, поэтому, как и для каналов без гелиевой пленки, были проведены численные расчеты.

5. Обсуждение результатов

Возникает важный вопрос, где энергетически выгодно находиться электрону — внутри канала или снаружи. Потенциал $U(r)$ слабо зависит от r вблизи центра канала, в то время как вблизи стенки зависимость $U(r)$ сильная. Следует отметить, что $U(r)$ всюду отрицательный. Потенциал $U(0)$ тем ниже, чем меньше радиус капилляра.

Значения энергии основного и возбужденных состояний электрона в каналах в твердом водороде и неоне без гелиевой пленки как функции радиуса канала R приведены в табл. 1 и 2, а для случая водорода и неона, покрытых гелиевой пленкой при $R_1 < d < R_2$, как функции R_1 и R_2 — в табл. 3 и 4.

Энергия связи электрона с плоской поверхностью твердого водорода, определяемая положением основного энергетического уровня, составляет -165 К. Из табл. 1 видно, что энергия основного состояния электрона в канале лежит ниже этого значения, т.е. электрону энергетически выгодно находиться в канале. В то же время возбужденные уровни расположены выше значения -165 К. Это означает, что электрон не может находиться внутри канала в возбужденном состоянии. Для каналов малого диаметра (см. первую и вторую строки табл. 1 и 2), несмотря на то что по абсолютной величине U_0 велико, электрон не может находиться в канале вследствие большой энергии нулевых колебаний. На рис. 4 приведены волновые функции основного и возбужденных состояний электрона в канале радиусом $R = 10^{-6}$ см из твердого неона. Видно, что в основном состоянии электрон преимущественно

Таблица 1. Энергетические уровни электрона в канале твердого водорода

Размеры канала, 10^{-6} см	n	Значения энергии				Положение максимума волновой функции, r/R_1
		$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	
$R = 0,10$	1	389,51	10825,88	30203,65	58372,48	0,00
	1	3886,22	18901,19	42660,17	75074,84	
	2	8832,33	28263,47	56526,94	93446,09	
$R = 0,50$	0	-388,62	-14,13	724,96	1826,53	0,54
	1	-326,80	284,40	1210,03	2494,25	
	2	-158,98	635,93	1745,27	3207,90	
$R = 1,0$	0	-278,22	-134,25	-31,80	298,53	0,83
	1	-269,25	-75,04	147,15	461,05	
	2	-244,66	1,10	274,69	635,92	
$R = 5,0$	0	-190,78	-63,77	-40,06	-31,58	0,966
	1	-190,35	-63,59	-39,18	-28,05	
	2	-189,72	-62,67	-37,27	-23,49	
$R = 10,0$	0	-179,17	-53,00	-31,00	-22,96	0,983
	1	-179,17	-52,95	-30,69		
	2	-178,99	-52,86	-27,75		
$R = 12,00$	0	-177,26	-51,91			0,986
	1	-177,26	-51,64			
	2	-177,14	-51,15			

Таблица 2. Энергетические уровни электрона в канале твердого неона

Размеры канала, 10^{-6} см	n	Значения энергии				Положение максимума волновой функции, r/R_1
		$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	
$R = 0,10$	0	706,6	11217,1	30913,2	58735,0	0,00
	1	4416,2	19431,1	43455,1	75958,1	
	2	8832,3	28705,1	56968,6	94064,4	
$R = 0,50$	0	-289,7	84,8	833,8	1939,6	0,270
	1	-194,3	388,6	1324,9	2614,4	
	2	-42,4	741,9	1858,3	3321,0	
$R = 1,00$	0	-203,1	-89,7	84,8	355,1	0,780
	1	-192,5	-23,0	203,1	521,1	
	2	-163,4	57,4	332,1	684,2	
$R = 5,00$	0	-131,8	-45,9	-30,2	-23,1	0,960
	1	-131,6	-45,9	-29,0	-18,5	
	2	-131,1	-44,9	-26,4	-13,2	
$R = 10,0$	0	-122,6	-37,5	-21,2	-9,9	0,980
	1	-122,5	-37,4	-21,3	-16,1	
	2	-122,4	-37,2	-21,2		
$R = 12,0$	0	-121,0	-35,9	-22,1	-11,5	0,981
	1	-121,0	-36,0			
	2	-121,8	-35,8			

Таблица 3. Энергетические уровни электрона в канале твердого водорода, покрытого гелиевой пленкой

Размеры канала, 10^{-6} см	n	Значения энергии				Положение максимума волновой функции, r/R_1
		$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	
$R_1 = 0,85$ $R_2 = 1,00$	0	-188,48	-53,79	207,82	594,12	0,43
	1	-156,48	52,57	378,97	826,39	
	2	-102,69	177,26	568,45	1078,21	
$R_1 = 2,30$ $R_2 = 2,50$	0	-111,70	-68,79	-39,32	10,43	0,84
	1	-110,19	-60,11	18,37	40,90	
	2	-106,02	-47,58	5,18	73,46	
$R_1 = 4,75$ $R_2 = 5,00$	0	-83,77	-45,02	-33,76	-25,64	0,92
	1	-83,54	-44,39	-31,67	-18,99	
	2	-82,83	-42,67	-28,22	-12,14	
$R_1 = 9,70$ $R_2 = 10,0$	0	-69,71		-32,18		0,96
	1	-67,19	-43,51			
	2	-67,93	-40,45			

Таблица 4. Энергетические уровни электрона в канале твердого неона, покрытого гелиевой пленкой

Размеры канала, 10^{-6} см	n	Значения энергии				Положение максимума волновой функции, r/R_1
		$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	
$R_1 = 0,85$ $R_2 = 1,00$	0	-149,63	-15,04	247,67	634,46	0,00
	1	-114,91	92,48	418,70	866,73	
	2	-58,68	217,60	606,34	1117,34	
$R_1 = 2,30$ $R_2 = 2,50$	0	-87,82	-53,43	-22,79	27,54	0,82
	1	-86,32	-43,49	-1,46	58,44	
	2	-81,81	-30,05	22,71	91,16	
$R_1 = 4,75$ $R_2 = 5,00$	0	-65,69	-34,76	-26,62	-16,83	0,91
	1	-64,75	-34,25	-23,10	-10,33	
	2	-64,59	-32,57	-18,85	-3,36	
$R_1 = 9,70$ $R_2 = 10,0$	0	-51,87	-31,60	-18,84		0,95
	1	-53,65				
	2	-53,28				

локализован вблизи стенки канала. При уменьшении радиуса канала максимум волновой функции смещается к центру (рис. 5).

При малых радиусах каналов влиянием «хвостов» потенциала можно пренебречь, и, как уже было сказано, рассматриваемая задача сводится к задаче о цилиндрической потенциальной яме с плоским дном. Зависимость от λ_n функций $\varphi_0(1)$, соответствующих решению уравнения Шредингера с потенциалом (8) и для цилиндрической потенциальной ямы с плоским дном, приведена на рис. 5. При уменьшении радиуса канала (до $R = 10^{-7}$ см) эти две функции становятся

еще более близкими, однако этот случай, представляющий чисто математический интерес, уже не описывает локализованные состояния электрона.

Отметим, что отличие одномерной электронной системы, рассмотренной в настоящей работе, от одномерной системы, изученной в [1], состоит в том, что энергетические уровни здесь, наряду с главным квантовым числом l , характеризуются еще и числом n , отвечающим вращательному движению частицы в канале. Это делает энергетический спектр более разнообразным и, в частности, дает возможность изучать эффекты, обусловленные квантованием магнитного потока.

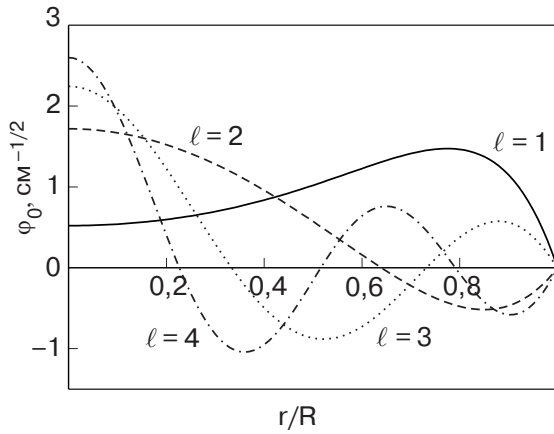


Рис. 4. Волновые функции в канале твердого неона радиусом $R = 1 \cdot 10^{-6}$ см, соответствующие основному ($l = 1$) и возбужденным ($l = 2, 3, 4$) состояниям.

Заключение

В настоящей работе предложен новый способ получения одномерных и квазиодномерных зарядовых систем с помощью поверхностных электронов. Указанные электронные системы могут быть реализованы с использованием цилиндрических каналов подходящего диаметра путем нанесения внутри канала слоя твердого водорода или неона и, при необходимости, с последующим покрытием стенок канала пленкой жидкого гелия. К сожалению, в такой системе не удастся получить насыщенных пленок гелия, так как канал вследствие больших капиллярных сил будет заполняться жидкостью.

Как показывают проведенные в работе расчеты, в таких каналах энергия связи электронов с подложкой зависит от диаметра канала и может существенно превышать энергию связи электрона с плоской подложкой, имеющей ту же толщину покрытия адсорбированным веществом. Поэтому в случае подложки, содержащей каналы, электроны будут прежде всего заряжать каналы, а потом плоские поверхности.

Можно ожидать, что в рассматриваемой системе перенос носителей будет весьма специфическим, особенно в каналах малого диаметра, где электрон локализован в центре канала. В этом случае сила, действующая на электрон со стороны диэлектрика, в среднем будет равна нулю, и в каналах с достаточно гладкими стенками подвижность электронов может быть очень высокой. Шероховатость поверхности стенки канала приводит к дополнительному рассеянию носителей и уменьшению подвижности. В канале с шероховатыми стенками должны наблюдаться процессы локализации носителей, в том числе и слабой локализации, изучение которых в ква-

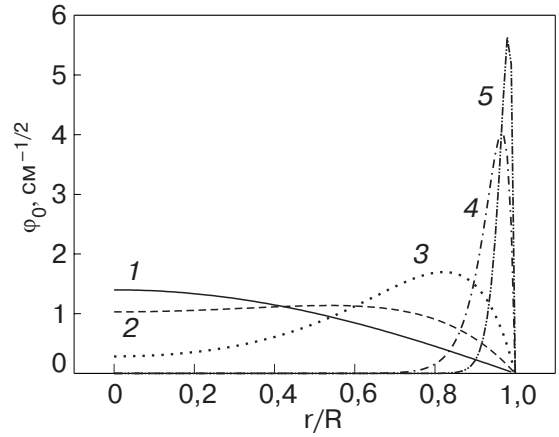


Рис. 5. Волновые функции электрона ($n = 0, l = 1$) в канале твердого водорода для различных радиусов канала R , см: $1 \cdot 10^{-7}$ (1); $5 \cdot 10^{-7}$ (2); $1 \cdot 10^{-6}$ (3); $5 \cdot 10^{-6}$ (4); $1 \cdot 10^{-5}$ (5).

зиодномерных каналах представляет существенный интерес [12].

Не менее интересным будет поведение электронов в магнитном поле, направленном вдоль оси канала. В работе [13] рассмотрена система электронов, локализованных над гелиевой пленкой, покрывающей тонкую диэлектрическую нить. Было показано, что магнитный момент системы электронов в этом случае оказывается осциллирующей функцией магнитного потока с периодом осцилляций he/c . Это явление вызывает в макроскопических системах эффект Ааронова — Бома. Наряду с осцилляциями магнитного момента при изменении магнитного поля должны иметь место осцилляции кинетических коэффициентов, в частности проводимости. Для наблюдения указанных эффектов необходимо выполнение условия $k_B T \ll E_0^2 = \hbar^2 / (2mR^2)$ (k_B — постоянная Больцмана), при этом относительная амплитуда осцилляций δ составляет величину порядка $(kR)^{-1/2}$, где k — импульс электрона [14]. Оценки показывают, что для каналов с $R = 10^{-6}$ см величина $E_0 \approx 0,35$ К и при $T = 0,03$ К величина $\delta \approx 2,5$, т.е. должны наблюдаться достаточно большие осцилляции проводимости.

Важный вопрос — распределение плотности заряда вдоль канала, которая для диэлектрических каналов, по-видимому, будет неоднородной. Однородности заряда можно достичь, помещая канал в металлический экран или располагая рядом, параллельно оси канала, плоский металлический электрод.

В работе [15] теоретически изучена кристаллизация электронного газа на сферической поверхности многоэлектронного пузырька. Было показано, что процессы кристаллизации в данном случае существенно отличаются от аналогичных процессов в двумерном электронном газе. Установлено, что под каждым электроном на поверхности жидкости образуются глубокие лунки, названные авторами рип-

ло-поляронами. При этом плавление кристалла происходит путем диссоциации рипло-поляронов, когда электроны покидают свои лунки. Можно предположить, что кристаллизация электронной системы в цилиндрической геометрии при большой плотности заряда также будет отличаться рядом особенностей, изучение которых представляет интерес.

1. Ю.З. Ковдря, Ю.П. Монарха, *ФНТ* **12**, 1011 (1986).
2. Ю.З. Ковдря, В.А. Николаенко, *ФНТ* **18**, 1278 (1992).
3. С.П. Гладченко, В.А. Николаенко, Ю.З. Ковдря, С.С. Соколов, *ФНТ* **27**, 3 (2001).
4. S.S. Sokolov, Guo-Qiang Hai, and N. Studart, *Phys. Rev.* **B51**, 5977 (1995).
5. G. Piacente, L.V. Schweigert, J.J. Betouras, and F.M. Peeters, *Phys. Rev.* **B59**, 045324 (2004).
6. K.M. Godshalk and R.B. Hallock, *Phys. Rev.* **B36**, 8294 (1987).
7. A.H. Wootters and R.B. Hallock, *Phys. Rev Lett.* **91**, 165301 (2003).
8. S.S. Sokolov and N. Studart, *Phys. Rev.* **B67**, 132510 (2003).
9. В.Б. Шикин, Ю.П. Монарха, Двумерные заряженные системы в гелии, Наука, Москва (1989).
10. Э. Камке, Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям, Наука, Москва (1971).
11. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1963).
12. Ю.З. Ковдря, В.А. Николаенко, С.П. Гладченко, Письма в *ЖЭТФ* **73**, 526 (2001).

13. Э.Н. Богачек, Г.А. Гогодзе, И.О. Кулик, *ФНТ* **4**, 1156 (1978).
14. Э.Н. Богачек, *ФНТ* **2**, 473 (1976).
15. J. Tempere, S.N. Klimin, I.F. Silvera, and J.T. Devreese, *Eur. Phys. J.* **B32**, 329 (2003).

One-dimensional and quasi-one-dimensional electron systems in nanochannels

T.I. Zuyeva, Yu.Z. Kovdrya, and S.S. Sokolov

The energy spectrum of electrons localized in cylindrical nanochannels with the walls covered with a thick layer of solid hydrogen or neon is studied theoretically. The potential of electron interaction with surrounding medium is estimated. An algorithm is developed to solve the wave equation, including both analytical and numerical calculations. The dependence of electron energy on channel radius is investigated and electron wave functions are defined. The influence of helium layer on energy states is considered. It is shown that for a channel radius more than 50 Å the electron localization inside the channel is energetically preferable.

Keywords: nanochannels, systems of reduced dimensionality, quasi-1D electronic systems