

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МАКРО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

А.М. Минаев, Л.Н. Тялина

ГОУ ВПО «Тамбовский государственный технический университет», г. Тамбов

Рецензент В.Ф. Першин

Ключевые слова и фразы: волна де Бройля; волновой вектор; волновая функция; наноразмерные структуры; разрешенные энергетические уровни; электрон; энергия.

Аннотация: Обсуждаются вопросы, связанные с границами применимости классической и квантовой физической теории в макро- и наноразмерных кристаллических структурах.

При исследовании физических свойств кристаллов обычно привлекается зонная теория твердых тел. Зачастую эта теория автоматически переносится на наноразмерные структурные образования. Такой перенос не всегда оправдан и может привести к ошибочным выводам, особенно при анализе электрических свойств в системах пониженной размерности. Рассмотрим сначала изменение энергии свободного (не связанного) электрона в зависимости от волнового вектора. Эта зависимость описывается известным уравнением:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1)$$

где E – энергия электрона; \hbar – постоянная Планка; k – волновой вектор; m – масса покоя электрона.

Из (1) видно, что на волновой вектор не накладывается ограничений: он изменяется непрерывно, также как и энергия. Можно сказать, что энергия свободного электрона не квантуется. Если же рассматривать движение электрона в периодическом поле кристаллической решетки, то ситуация меняется коренным образом. Для описания поведения электрона в кристалле используется импульсное пространство, или пространство волновых векторов (обратное пространство), где длине L в обычном пространстве соответствует длина $\frac{2\pi}{L}$ в обратном пространстве.

Минаев А.М. – кандидат технических наук, доцент кафедры «Материалы и технология» ТамбГТУ; Тялина Л.Н. – кандидат технических наук, доцент кафедры «Материалы и технология» ТамбГТУ, г. Тамбов.

Для удобства совмещения размерностей периодическая структура кристалла представляется в обратном пространстве, где трансляционный вектор (K) кристаллической решетки выражается в виде $2\pi/a$, т.е. имеет размерность обратной длины (см^{-1}). Если для свободного электрона волновой вектор k (и энергия) изменяются непрерывно, то в кристаллической решетке возникают важные ограничения на волновой вектор: его значения могут принимать величины $2\pi n/Na$, где N – число атомов (или кристаллических ячеек), $n = 0, \pm 1, \pm 2$; т.е. волновому вектору k и соответственно энергии «разрешено» изменяться лишь дискретно.

Число разрешенных значений энергии для электрона будет определяться числом разрешенных значений волнового вектора $k = 2\pi n/Na$. В макрокристалле ($N \approx 10^{22}$) спектр разрешенных энергий становится настолько плотным, что уровни энергии перекрываются (принцип неопределенности Гейзенберга), и дискретностью энергий (квантованием) можно пренебречь, считая энергетический спектр квазинепрерывным как для свободного электрона. Из описанных соотношений видно также, что при переходе от макрокристалла ($N \sim 10^{22}$) к наноразмерным структурам ($N \sim 10 \cdot 10^1 \dots 10 \cdot 10^2$) минимальное значение волнового вектора $k = 2\pi n/Na$ отличное от нуля для наноструктуры будет на несколько порядков больше, чем для макрокристалла. Из этого следует, что предельное значение волнового вектора $k = 2\pi n/Na = \pi/a$ при $2n/N = 1$, в наноразмерных кристаллических структурах будет достигнуто при меньших значениях квантового числа n . Это, в свою очередь, дает основание сделать заключение о том, что число разрешенных энергетических уровней n в наноструктурах значительно меньше, чем в макрокристаллах, перекрытие же уровней в отличие от макрокристалла станет менее вероятным. Пренебрегать дискретностью (квантованием) энергий в таких условиях уже нельзя.

В квантовой теории часто применяется термин «электронные волны». В это понятие, к сожалению, нередко вкладывается смысл классической волны. Однако по современным представлениям эти волны не являются силовыми в отличие от гравитационных, электромагнитных, звуковых и др. Но если электроны не могут сформировать классическую волну, то тогда возникает вопрос – как же понимать содержание волнового уравнения Шредингера, описывающего поведение электрона в кристалле, решением которого является плоская волна типа $\psi(x) \sim \exp ikx$.

Как утверждают основоположники квантовой теории (например Борн), волновая функция $\psi(x)$ – есть вероятность обнаружить электрон в данной точке объема в заданный момент времени (временное уравнение Шредингера). Эта вероятность хорошо описывается в терминах, используемых для характеристик классических волновых процессов. Корректнее назвать функцию $\psi(x)$ не волновой функцией (устаревший термин), а амплитудой вероятности.

Требует пояснений также понятие «длина волны электрона». Оно возникло из экспериментов по пропусканию электронного пучка через

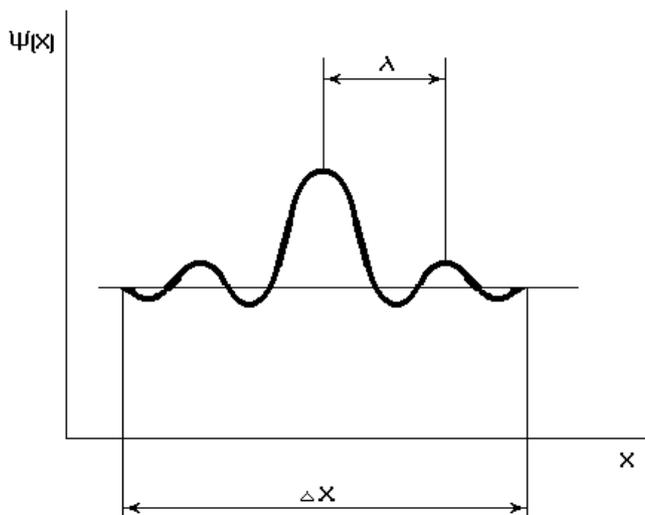


Рис. 1. Размытость (неопределенность) Δx центра масс. Средняя длина волны λ функции $\psi(x)$, схема

тонкий кристалл. Прошедший через такую дифракционную решетку электронный луч на фотоприемнике (детекторе) образовывал интерференционную картину, что являлось несомненным признаком суперпозиционных явлений классических волн. Зная расстояния между интерференционными линиями по аналогии с дифракционной картиной рентгеновских лучей была определена длина «волны» электрона. Эта длина оказалась равной длине волны, вычисленной по известной формуле де Бройля, связывающей корпускулярные P и волновые λ свойства частиц: $P = h/\lambda$, где $P = mv$ – импульс; m – масса частицы; v – скорость; h – постоянная Планка; λ – длина волны.

Здесь полезно напомнить, что де Бройль, создавая свою знаменитую формулу, под длиной волны λ имел в виду совсем другое. Он пришел к выводу, что реальный (не математический) центр масс любой частицы «размыт», а так как в функции положения $\psi(x)$ центра масс закодирован импульс P , то эта функция должна выглядеть так, как показано на рис.1.

Де Бройль считал, что импульс P обратно пропорционален длине волны λ . Коэффициентом пропорциональности оказалась фундаментальная физическая постоянная Планка h . Из этой схемы понятно, что $\psi(x)$ описывает вероятность положения центра масс Δx какой-то частицы. За пределами Δx функция $\psi(x)$ стремится к нулю. Для частиц, находящихся в связанном состоянии (электрон в атоме), $\psi(x)$ можно представить в более простой форме – в виде гармонической волны, что и сделал Шредингер, выразив функцию $\psi(x)$ в виде плоской волны типа $\sim \exp ikx$.

Таким образом, при описании электронных состояний в наноразмерных структурах необходимо аккуратно обращаться с такими привычными классическими понятиями как электронные волны, волновые функции, электронный резонанс, интерференция, которые не отражают физическое содержание этих терминов в представлениях современной квантовой теории.

Specific Features of Electronic States in Macro- and Nano-Sized Structures

A.M. Minaev, L.N. Tyalina

Tambov State Technical University, Tambov

Key words and phrases: de Broigle wave; wave vector; wave function; nano-sized structures; resolved energy levels; electron; energy.

Abstract: Matters associated with the limits of application of classical and quantum physical theory in macro- and nano-sized crystal structures are discussed.

© А.М. Минаев, Л.Н. Тялина, 2008