

**Влияние вырождения энергетических уровней на возможность применения метода функционалов плотности в случае систем пониженной размерности**

# 07, июль 2012

DOI: 10.7463/0712.0435255

Руцкая А. М.

УДК 539.19 + 539.2

Россия, МГТУ им. Н.Э. Баумана

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

В настоящее время в связи с исследованиями нанообъектов в нерелятивистской квантовой механике многочастичных систем возникла принципиально новая проблема. Она связана с тем, что, в отличие от хорошо изученных и обладающих известной симметрией объектов, таких как атомы, молекулы и твердые тела макроскопических размеров с выраженной кристаллической структурой, нанообъекты не обладают предсказуемостью свойств, определенных их симметрией [1-2]. 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 [1-5].

В частности, особое значение 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, а также о существовании 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 представляет особый интерес 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 [1-2]. 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 [2].

В работе были рассмотрены наноразмерные системы с цилиндрической симметрией – квантовые проволоки.

### *1. Электронный газ в квантовой проволоке*

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

Объектом нашего рассмотрения являлись системы невзаимодействующих фермионов, находящихся в простейшем прямоугольном удерживающем потенциале. Заметим, 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

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

Волновая функция в этом случае может рассматриваться как сумма однодетерминантных волновых функций

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

Рассматривая 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

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

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

где ось  $X$  – направлена вдоль квантовой проволоки,  $K_x$  - одномерный волновой вектор, определяемый соотношением  $K_x = \frac{2\pi}{L_x} n_1$ , где  $n_1 = \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $L_x$  - 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 равна

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

Таким образом, задача оказывается точно решаемой.

Энергетический спектр квантовой проволоки разбивается 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  $Y, Z$  движение ограничено.

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

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

Согласно этому 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.

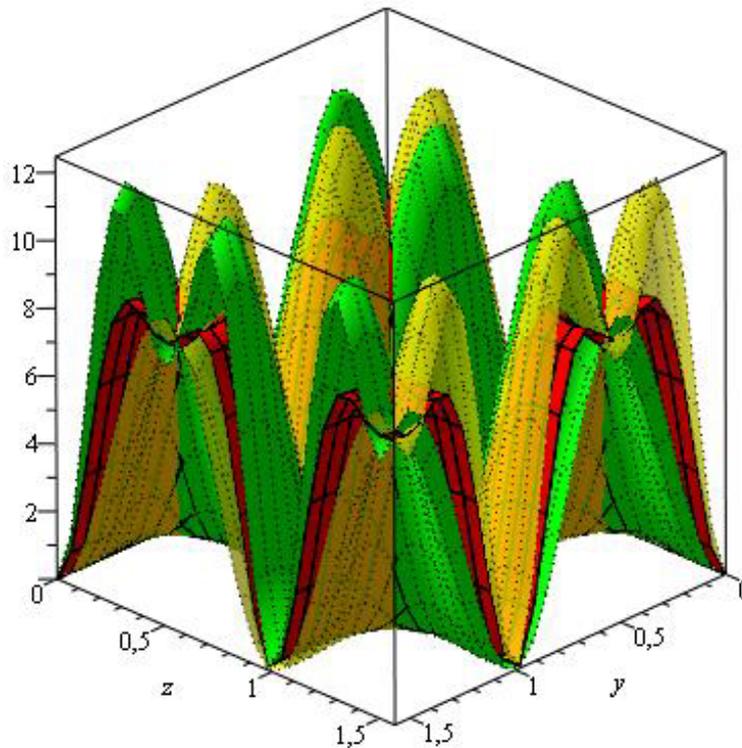
Таким образом, состояние с одной и той же энергией соответствует различным пространственным распределениям электронов, что приводит к расхождению результатов для электронной плотности, определяющей, в частности, отклик системы на внешнее воздействие. Из этого следует, что привычный метод оценки достоверности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

Проиллюстрируем приведенные соображения, осуществив 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 1 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  $K_x = K_{x\min}$ .



red - (1,1), (1,1), (1,2), (2,1) and blue- (1,1), (1,1), (1,2), (2,1)  
green - (1,1), (1,1), (1,2), (1,2)  
yellow - (1,1), (1,1), (2,1), (2,1)

Рисунок 1 - Различные распределения электронной плотности  $n(r)$

В соответствии с [3-5], функция плотности основного состояния электронного газа в квантовой проволоке  $n(r)$  удовлетворяет дифференциальному уравнению

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

Очевидно, что при симметрии граничных условий из симметрии уравнения (1) следует, что одному и тому же значению  $E_{gs}$  энергии основного состояния могут соответствовать по крайней мере два решения:  $n_1(y, z)$  и  $n_2(y, z)$ , удовлетворяющие соотношению  $n_2(y, z) = n_1(z, y)$ .

## *Заключение*

Нам удалось показать, что решение вариационной задачи может приводить к одной из функций плотности, принадлежащей множеству функций плотности основного состояния данной системы [6]. Вероятность реализации этого состояния в рамках метода функционалов плотности оценена быть не может. Показано, что энергия основного состояния не может рассматриваться как основной критерий, 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 мы сталкиваемся с реализацией ситуации, 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.

## **Литература**

1. Sholl D.S., Stechel J.A. Density Functional Theory. A practical introduction. – John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2009. – 238 p.
2. Martin R.M. Electronic Structure. Basic Theory and Practical methods. – Cambridge University Press, 2004. – 642 p.
3. Dreizler R.M., Gross E.K.U. Density Functional Theory. – Springer-Verlag. 1990. – 303 pp.

4. Марч Н., Кон., Вашишта П., Лундквист С., Уильямс А., Барт У., Лэнг Н. Теория неоднородного электронного газа: Пер. с англ./Под ред. С. Лундквиста и Н. Марча. – М.: Мир, 1987– 400с.
5. Parr R.G., Weitao Yang Density-functional theory of atoms and molecules. – Oxford University Press – 1989. – 333 p.
6. Руцкая А.М - Однозначность связей между множествами гамильтонианов, порождаемых ими функций и множеством энергий основного состояния - Актуальные проблемы фундаментальных наук: сборник трудов IV научно-методической конференции аспирантов и молодых исследователей. - М: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. С. 114-116.

**Influence of degeneracy of energy levels on possibility of using the method of density functional in the case of low-dimensional systems**

# 07, July 2012

DOI: 10.7463/0712.0435255

Ruckaya A.M.

Russia, Bauman Moscow State Technical University  
[anna8502@mail.ru](mailto:anna8502@mail.ru)

The author considers nanoscale systems of noninteracting fermions with cylindrical symmetry (quantum wires) which are in the simplest rectangular confining potential. It was shown that for low-dimensional quantum systems, the degeneracy of levels is primarily determined by the symmetry of the problem, and - depending on the type of building - not only degeneration caused by the presence of axial symmetry is possible, but also accidental degeneracy. Thus, the state with the same energy corresponds to different spatial distributions of electrons, which leads to divergence of results for electron density, which determines, in particular, system response to external stimuli. It follows that the usual method for estimating reliability of theoretical analysis results - comparison of energy performance characteristics - does not allow judge how close to reality the result of calculating the electron density is.

---

**Publications with keywords:** [density functional method](#), [non-relativistic Fermi-system](#), [eigenvalues](#), [variational methods](#)

**Publications with words:** [density functional method](#), [non-relativistic Fermi-system](#), [eigenvalues](#), [variational methods](#)

---

## References

1. Sholl D.S., Steckel J.A. *Density functional theory: A practical introduction*. Hoboken, NJ, Wiley, 2009. 252 p.
2. Martin R.M. *Electronic structure: Basic theory and practical methods*. Cambridge, CUP Publ., 2004. 650 p.
3. Dreizler R.M., Gross E.K.U. *Density functional theory: An approach to the quantum many-body problem*. Berlin, Springer, 1990. 303 p.
4. Kohn W., Vashishta P. General density functional theory. *Theory of the inhomogeneous electron gas*. New York, Plenum, 1983, pp. 79-147. (Russ. ed.: March N., Kon V., Vashishta P., Lundkvist S.,

- Uil'iams A., Bart U., Leng N. *Teoriia neodnorodnogo elektronogo gaza*. Moscow, Mir Publ., 1987. 400 p.).
5. Parr R.G., Weitao Y. *Density-functional theory of atoms and molecules*. New York, Oxford Univ. Press Publ., 1989. 333 p. (*International Series of Monographs on Chemistry*).
6. Rutskaia A.M. Odnoznachnost' sviazei mezhdu mnozhestvami gamil'tonianov, porozhdaemykh imi funktsii i mnozhestvom energii osnovnogo sostoianiia [The uniqueness of relationships between sets of Hamiltonians, functions generated by them, and the set of ground-state energies]. *Aktual'nye Problemy Fundamental'nykh Nauk. Sb. Tr. 4 Nauch.-Metod. Konf. Aspirantov i Molodykh Issledovatelei* [Actual Problems of Basic Science. Coll. Works 4<sup>th</sup> Sci. and Method. Conf. of Young Researchers and Graduate Students]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2009, pp. 114-116.