Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Й. Брюнинг, С. Ю. Доброхотов, М. И. Кацнельсон, Д. С. Миненков, Квазиклассические асимптотики и плотность состояний для двумерных центрально-симметричных уравнений Шредингера и Дирака в задачах туннельной микроскопии, *ТМФ*, 2016, том 186, номер 3, 386–400

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8987>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.81.137.203

26 апреля 2023 г., 17:50:20

© 2016 г.

Й. Брюнинг*, С. Ю. Доброхотов^{†‡},
М. И. Кацнельсон^{§¶}, Д. С. Миненков^{†‡}

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ АСИМПТОТИКИ И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ДВУМЕРНЫХ ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫХ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА И ДИРАКА В ЗАДАЧАХ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Рассматриваются двумерные стационарные уравнения Шредингера и Дирака с центрально-симметричным потенциалом, моделирующим заряженную иглу сканирующего туннельного микроскопа. На основе асимптотик для обобщенных собственных функций вычислена плотность состояний под иглой, связанная с измерениями с помощью микроскопа. Показано, что в случае уравнения Дирака игла микроскопа искажает измеряемую плотность состояний при всех энергиях.

Ключевые слова: радиально-симметричные двумерные операторы Шредингера и Дирака, обобщенные собственные функции, квазиклассическое приближение, плотность состояний, туннельная микроскопия.

DOI: 10.4213/tmf8987

Настоящая работа выполнена при поддержке грантов DFG-RAS (№ 2436 RUS 113/990/0-1), Германия, РФФИ (№ 12-01-31196) и Государственной программы поддержки ведущих университетов (Постановление 211 Правительства РФ, контракт № 02.A03.21.006).

*Humboldt University, Berlin, Germany. E-mail: bruening@mathematik.hu-berlin.de

[†]Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия.
E-mail: dobr@ipmnet.ru, minenkov.ds@gmail.com

[‡]Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл., Россия

[§]Institute for Molecules and Materials, Radboud University, Nijmegen, the Netherlands.
E-mail: M.Katsnelson@science.ru.nl

[¶]Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

1. ВВЕДЕНИЕ

Наше исследование связано со следующим вопросом: насколько игла сканирующего туннельного микроскопа [1] влияет на измеряемые величины? Исследуется влияние потенциала, индуцированного иглой микроскопа, на электронные состояния в кристалле. Мы рассматриваем ситуацию, когда на подложке расположен двумерный кристалл, к которому поднесена игла электронного микроскопа. Между иглой и подложкой задается разность потенциалов U_0 , в результате чего между иглой и кристаллом возникает туннельный ток, который измеряется микроскопом и который пропорционален локальной плотности состояний (а также плотности электронов) в точке кристалла под иглой (см. работы [2], [3] и библиографию в них). В то же время в кристалле возникает потенциал $U(r)$, наведенный иглой микроскопа и искажающий измеряемую плотность состояний. Математическая постановка задачи такова: требуется построить асимптотики для обобщенных собственных функций стационарных уравнений Шредингера и Дирака на плоскости с центрально-симметричным потенциалом $U(r)$ и определить локальную плотность состояний в точке максимума потенциала (т.е. под иглой).

Мы рассматриваем плоскую подложку и предполагаем, что двумерный кристалл “прозрачен” для поля. Используя модель из работы [4] для электростатического поля иглы рядом с плоским экраном, мы моделируем электростатический потенциал между иглой и подложкой, в том числе электростатический потенциал $u(x, y, z)|_{z=z_{\text{cryst}}}$, создаваемый иглой в двумерном кристалле (см. рис. 1). Далее мы рассматриваем двумерное уравнение Шредингера в случае кристалла с квадратной кристаллической решеткой или двумерное уравнение Дирака для кристалла с гексагональной решеткой. В уравнения входит центрально-симметричный потенциал $U(x, y) = q_e u(x, y, z)|_{z=z_{\text{cryst}}}$, наведенный иглой микроскопа (здесь q_e – заряд электрона). Будем считать, что потенциал $U(r)$ монотонно убывает и стремится на бесконечности к нулю. Предполагается, что масса $m(r)$ в уравнении Дирака центрально-симметрична и имеет на бесконечности конечный предел (не обязательно равный нулю), например, можно рассматривать постоянную массу.

После введения характерного масштаба энергии E_0 и длины L_0 получаются безразмерные уравнения с малым (квазиклассическим) параметром перед производными. Рассмотрим двумерное стационарное уравнение Шредингера

$$-h^2 \Delta \psi - (E - U(r)) \psi = 0 \quad (1.1)$$

или уравнение Дирака

$$\begin{pmatrix} m(r) & -ihe^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ -ihe^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) & -m(r) \end{pmatrix} \Psi - (E - U(r)) \Psi = 0, \quad (1.2)$$

где $x \in \mathbb{R}^2$, $x_1 = r \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \varphi$,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

есть оператор Лапласа, $U(r) = U(|x|)$ – потенциал, $m(r)$ – масса, $h \ll 1$ – квазиклассический параметр, возникающий в результате обезразмеривания: $h^2 \equiv \hbar^2 / (2m_e E_0 L_0^2)$

Рис. 1. Эквипотенциальные линии поля иглы микроскопа (а); белая область отмечает моделируемую поверхность иглы микроскопа, сплошная линия $z = 0$ – подложку, штриховая линия – рассматриваемый двумерный кристалл. Потенциал в двумерном кристалле (б) для иглы (сплошная линия), точечного заряда (штриховая линия) и модельного параболического потенциала (пунктир).

для уравнения Шредингера и $\hbar \equiv \hbar v_F / (E_0 L_0)$ для уравнения Дирака, $\hbar$ – постоянная Планка, m_e – масса электрона, v_F – скорость Ферми. При расчетах используются параметры иглы микроскопа из работы [5], индуцированный потенциал изображен на рис. 1.

Для расчета локальной плотности состояний можно использовать два подхода. Один из них заключается в том, что рассматривается задача в ограниченной области $r = \sqrt{x^2 + y^2} \leq R$ с граничными условиями при $r = R$ (например, условиями Дирихле $\psi|_{r=R} = 0$ для уравнения Шредингера) и вычисляется плотность состояний для дискретного спектра E_k по формуле [6]

$$\text{LDOS}(E_k)|_{r=0} = |\psi_k(0)|^2 D(E_k) = \frac{|\psi_k(0)|^2}{\Delta E_k}, \quad \Delta E_k \equiv E_{k+1} - E_k. \quad (1.3)$$

Другой вариант – рассматривать задачу в неограниченной области $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, ставить условие нормировки собственных функций непрерывного спектра на дельта-функцию, $\int_{\mathbb{R}^2} \psi_k \psi_{k_1}^* dx = \delta(k - k_1)$, и определять плотность состояний для непрерывного спектра как (см. например, книгу [7])

$$\text{LDOS}(E)|_{r=0} \equiv \int |\psi(0, E(k))|^2 \delta(E(k) - E) dk = |\psi(0, E)|^2 \left(\frac{dE(k)}{dk} \right)^{-1} \Big|_{E(k)=E}. \quad (1.4)$$

Зависимость энергии $E(k)$ от модуля волнового числа k имеет вид $E(k) = \hbar^2 k^2$, $dE(k)/dk = 2\hbar^2 k = 2\hbar \sqrt{E(k)}$ в случае уравнения Шредингера и вид $E(k) = \hbar k$, $dE(k)/dk = \hbar$ в случае уравнения Дирака.

Как показано в монографии [6], эти подходы эквивалентны для точных собственных функций: в пределе $R \rightarrow \infty$ плотность состояний для дискретного спектра переходит в плотность состояний для непрерывного спектра. В случае конечной области

можно сформулировать точный математический результат для асимптотик волновых функций: поскольку задача центрально-симметричная и потому эффективно одномерная, асимптотики являются асимптотическими волновыми функциями, т. е. приближают точные решения. Асимптотики имеют вид функций Бесселя [8]. Окончательные формулы зависят от размера области R и довольно громоздки. В случае бесконечной области окончательные формулы имеют простой наглядный вид, но теорем о том, что представленные формулы являются асимптотиками решения, насколько нам известно, нет. Тем не менее если формально использовать полученные асимптотические формулы для задачи с неограниченной областью, нормировать их на дельта-функцию и найти для них плотность состояний, то ответ для плотности состояний совпадает с пределом асимптотической плотности состояний для ограниченной области при $h = \text{const} > 0$, $R \rightarrow \infty$.

Таким образом, ответ для плотности состояний, рассчитанный в случае бесконечной области для “асимптотической волновой функции”, имеет простой наглядный вид и представляется физически разумным.

Структура работы следующая. В разделе 2 проводится разделение переменных в центрально-симметричном случае. Систему Дирака в этом случае можно свести к двум уравнениям типа возмущенного уравнения Шредингера с эффективным потенциалом, зависящим от исходного потенциала, энергии и массы (см. монографию [9]). В разделе 3 приводятся формулы для главного члена асимптотики волновой функции в случае бесконечной области и плотность состояний для этих асимптотик. Результаты представлены на рис. 2. В приложении А приведены квазиклассические асимптотики решения (см. рис. 3) и процедура их нормировки на дельта-функцию. В приложении Б выписаны точные решения уравнения Шредингера в случае квадратичного потенциала (см. рис. 4). Для уравнения Дирака точное решение приведено только для уровня энергии $E = U(0)$ и нулевой массы (см. рис. 5).

2. РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ, РЕДУКЦИЯ СИСТЕМЫ ДИРАКА К СКАЛЯРНЫМ УРАВНЕНИЯМ

Благодаря симметрии переменные в уравнениях (1.1), (1.2) разделяются, после чего задача становится эффективно одномерной. Уравнение Шредингера (1.1) при подстановке $\psi(x) = e^{il\varphi}\psi(r)$, $l \in \mathbb{Z}_+$, переходит в

$$-h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l^2}{r^2} \right) \psi - (E - U(r)) \psi = 0.$$

В окрестности $r = 0$ решение имеет вид $\psi = c J_l \left(\frac{r}{h} \sqrt{E - U_0} \right)$, так что если $l \neq 0$, то $\psi(0) = 0$. Вклад в плотность состояний в точке $r = 0$ дают только собственные функции с нулевым угловым моментом, и достаточно рассмотреть одномерное уравнение

$$-h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi - n^2(r) \psi = 0, \quad n^2(r) = E - U(r). \quad (2.1)$$

Аналогично, подстановка $\Psi(x) = (e^{il\varphi}\psi_1(r), e^{i(l+1)\varphi}\psi_2(r))^T$ в систему Дирака дает (см., например, монографию [9])

$$\begin{aligned} \psi_2 &= -ih \frac{1}{v_+} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right) \psi_1, \quad v_+(r) = E - U(r) + m(r), \\ -h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2} \right) \psi_1 + h^2 \frac{v'_+}{v_+} \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l}{r} \right) \psi_1 - ((E - U)^2 - m^2) \psi_1 &= 0 \end{aligned}$$

или, эквивалентно,

$$\begin{aligned} \psi_1 &= -ih \frac{1}{v_-} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) \psi_2, \quad v_-(r) = E - U(r) - m(r), \\ -h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)^2}{r^2} \right) \psi_1 + h^2 \frac{v'_-}{v_-} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l+1}{r} \right) \psi_2 - ((E - U)^2 - m^2) \psi_2 &= 0. \end{aligned}$$

Вклад в плотность состояний в точке $r = 0$ дают решения с $l = 0$, когда $\psi_1(0) \neq 0$, и с $l = -1$, когда $\psi_2(0) \neq 0$. Имеем при $l = 0$

$$-h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_1 - n_1^2 \psi_1 + h^2 \frac{v'_+}{v_+} \frac{\partial}{\partial r} \psi_1 = 0, \quad \psi_2 = -ih \frac{1}{v_+} \psi'_1, \quad (2.2)$$

а при $l = -1$

$$-h^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi_2 - n_1^2 \psi_2 + h^2 \frac{v'_-}{v_-} \frac{\partial}{\partial r} \psi_1 = 0, \quad \psi_1 = -ih \frac{1}{v_-} \psi'_2, \quad (2.3)$$

где

$$n_1 = \sqrt{(E - U)^2 - m^2}, \quad v_{\pm}(r) = E - U(r) \pm m(r).$$

При нулевой массе случай $l = -1$ симметричен относительно перестановки ψ_1 и ψ_2 , что отражает симметрию относительно компонент псевдоспина.

Мы будем рассматривать уравнения (2.1) и (2.2) в области $r \in \mathbb{R}_+$ и дополним их условием гладкости при $x = 0$ и условием нормировки на дельта-функцию:

$$\begin{aligned} \psi'(0) &= 0, \quad \iint_{\mathbb{R}^2} \psi_k \psi_{k_1}^* dx = \delta(k - k_1), \\ \psi'_1(0) &= 0, \quad \iint_{\mathbb{R}^2} \Psi_k \Psi_{k_1}^* dx = \iint_{\mathbb{R}^2} (\psi_{1,k} \psi_{1,k_1}^* + \psi_{2,k} \psi_{2,k_1}^*) dx = \delta(k - k_1), \end{aligned} \quad (2.4)$$

где k – модуль волнового вектора, $\psi_k = \psi(x; E(k))$. Для уравнения (2.3) условие гладкости имеет вид $\psi'_2(0) = 0$.

В случае несимметричного потенциала точно разделить переменные и уравнения, как правило, нельзя, и необходимо использовать адиабатический метод [10], [11].

3. ГЛАВНЫЙ ЧЛЕН АСИМПТОТИКИ. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Для уравнений (2.1)–(2.3) асимптотическое решение дается каноническим оператором Маслова [12], для которого в данном случае удобно использовать представление, недавно полученное в работе [13]:

$$\psi(x) = \oint \varphi(x, \theta, h) e^{(i/h)\Phi(x, \theta)} d\theta, \quad \Phi(x, \theta) = T(x\mathbf{n}(\theta)), \quad \mathbf{n}(\theta) = (\cos \theta, \sin \theta),$$

где эйконал $T(r) = \int_0^r n(r) dr$ равен $T(r) = \int_0^r \sqrt{E - U} dr$ для уравнения Шредингера (2.1) и равен $T(r) = \int_0^r \sqrt{(E - U)^2 - m^2} dr$ для уравнений (2.2), (2.3), к которым сводится уравнение Дирака. Это представление можно использовать и в случае, когда потенциал $U(x)$ не обладает симметрией. В таком представлении можно достаточно просто определить поправки к главному члену асимптотики. С учетом симметрии оно принимает вид интегрального представления функции Бесселя [8]:

$$\begin{aligned} \psi(r, h) &= \int e^{(i/h)T(r, h) \cos \eta} \varphi(r, h) d\eta = 2\pi \varphi(r, h) J_0\left(\frac{1}{h}T(r, h)\right), \\ T(r, h) &= T(r) + hT_1(r) + \dots, \quad \varphi(r, h) = \varphi_0(r) + h\varphi_1(r) + \dots, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где $T_k(r), \varphi_k(r) \in C^\infty(\mathbb{R}_+)$.

Для уравнения Шредингера главный член асимптотики для надбарьерных состояний $E > U(0)$ имеет вид

$$\psi(r) = \frac{\sqrt[4]{E}}{\sqrt{2\pi h}} \frac{\sqrt{T(r)}}{\sqrt{r} \sqrt[4]{E - U(r)}} J_0\left(\frac{1}{h}T(r)\right) (1 + O(h)). \quad (3.2)$$

При $E < U(0)$ в классически запрещенной области (при $r < r_0(E)$, где $r_0(E)$ – точка поворота, $U(r_0(E)) = E$) главный член асимптотики имеет вид

$$\psi(x) = \frac{\sqrt[4]{E}}{\sqrt{2\pi h}} \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_0^{r_0(E)} \sqrt{U(r) - E} dr\right\} \frac{\sqrt{T_{\text{tun}}(r)}}{\sqrt{r} \sqrt[4]{U(r) - E}} J_0\left(\frac{1}{h}T_{\text{tun}}(r)\right) (1 + O(h)), \quad (3.3)$$

где

$$T_{\text{tun}}(r) = \int_0^r |n(r)| dr = \int_0^r \sqrt{U(r) - E} dr.$$

Плотность состояний в нуле для надбарьерных состояний и состояний с классически запрещенной областью соответственно равна

$$\begin{aligned} \text{LDOS}_{\text{Sch}}(E) &= \frac{1}{4\pi h^2} (1 + O(h)), & E > U(0), \\ \text{LDOS}_{\text{Sch}}(E) &= \frac{1}{4\pi h^2} \exp\left\{-\frac{2}{h} \int_0^{a(E)} \sqrt{U(r_1) - E} dr_1\right\} (1 + O(h)), & E < U(0). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Плотность состояний над барьером (первое выражение в (3.4)) совпадает с плотностью состояний при нулевом потенциале. Плотность состояний под барьером является экспоненциально малой. Графики плотности состояний представлены на рис. 2.

В случае уравнения Дирака с нулевой массой эффективный потенциал имеет вид $n_1^2(r) = |E - U(r)|$, и классически запрещенная область отсутствует. Главный член асимптотики записывается как

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2\pi h}} \frac{\sqrt{T(r)}}{\sqrt{r}} J_0\left(\frac{1}{h}T(r)\right) (1 + O(h)), \quad (3.5)$$

Рис. 2. Плотность состояний для уравнения Шредингера (а), соответствующая главному члену асимптотики для потенциала иглы (сплошная линия), точному решению для параболического потенциала (штриховая линия) и точному решению с нулевым потенциалом (пунктир). Плотность состояний для уравнения Дирака (б), соответствующая главному члену асимптотики, для потенциала в случае ненулевой массы (сплошная линия), для потенциала в случае нулевой массы (штриховая линия) и для уравнения без потенциала и массы (пунктир). Максимум наведенного потенциала равен $U(0) = 0.46$, масса для уравнения Дирака выбрана равной $m = 0.1$. Квазиклассический параметр $h = 0.1$ в обоих случаях.

а плотность состояний равна (с учетом симметрии относительно компонент ψ_1, ψ_2 псевдоспина)

$$\text{LDOS}_{\text{Dir}}(E) = \frac{|E - U(0)|}{2\pi h^2} (1 + O(h)). \quad (3.6)$$

Если при этом $E < U(0)$, то можно говорить о плотности “дырочных” состояний. Плотность состояний при нулевом потенциале равна $E/2\pi h^2$. Наличие потенциала приводит к “сдвигу” этой зависимости: плотность состояний уменьшается на величину $U_0/2\pi h^2$, одинаковую для всех энергий $E > U(0)$ выше потенциального барьера (см. рис. 2).

В случае уравнения Дирака с ненулевой массой эффективный потенциал в уравнениях (2.2), (2.3) равен $n_1^2(r) = (E - U(r))^2 - m(r)^2$ и может принимать отрицательные значения, т. е. возникает классически запрещенная область. При ненулевой массе также нарушается симметрия относительно компонент псевдоспина.

Рассмотрим несколько режимов.

РЕЖИМ 1: $E > U(0) + m(0)$. В этом случае при всех $r \in \mathbb{R}_+$ эффективный потенциал положителен и волновая функция является осциллирующей.

РЕЖИМ 2: $U(0) - m(0) < E < U(0) + m(0)$. В этом случае присутствует одна точка поворота r_- , для которой $v_-(r_-) = E - U(r_-) - m(r_-) = 0$; при $r > r_-$ эффективный потенциал положителен и волновая функция осциллирует, в классически запрещенной области $r < r_-$ эффективный потенциал меньше нуля и волновая функция экспоненциально убывает.

РЕЖИМ 3: $U(\infty) + m(\infty) < E < U(0) - m(0)$. В этом случае присутствуют две точки поворота $r_+ < r_-$ такие, что $v_{\pm}(r_{\pm}) = E - U(r_{\pm}) \pm m(r_{\pm}) = 0$; при $r > r_-$ и при $r < r_+$ эффективный потенциал положителен и волновая функция осциллирует, при $r_+ < r < r_-$ эффективный потенциал отрицателен и мы имеем дело с туннельной волновой функцией. При $r < r_+$ стационарные состояния имеют дискретный спектр энергий E_j : это либо квазистационарные (гамовские) состояния, которые со временем туннелируют и уходят на бесконечность, либо состояния, пришедшие с бесконечности при резонансном (клеиновском) туннелировании (аналогичные эффекты описаны в работе [14]).

Главный член для плотности состояний в нуле в этих трех случаях имеет вид (квазиклассические асимптотики волновых функций и вывод нормировочных констант представлены в приложении А)

$$\begin{aligned} \text{РЕЖИМ 1:} \quad \text{LDOS}_{\text{Dir}}(E) &= \frac{v_+(0) + v_-(0)}{4\pi\hbar^2} = \frac{E - U(0)}{2\pi\hbar^2}; \\ \text{РЕЖИМ 2:} \quad \text{LDOS}_{\text{Dir}}(E) &= \frac{m(0)}{2\pi\hbar^2} \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{r_-(E)} |n_1| dr\right\}; \\ \text{РЕЖИМ 3:} \quad \text{LDOS}_{\text{Dir}}(E_j^{\pm}) &= \frac{|v_{\pm}(0)|}{16\pi\hbar \Delta E_j^{\pm}} \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_{r_+(E_j^{\pm})}^{r_-(E_j^{\pm})} |n_1| dr\right\}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

В последней формуле $\Delta E_j^{\pm} \equiv E_{j+1}^{\pm} - E_j^{\pm}$ есть расстояние между дискретными уровнями энергии квазистационарных состояний $E_j^{\pm}$, уровни E_j^+ соответствуют угловому моменту $l = 0$ и уровни E_j^- – моменту $l = -1$ (см. приложение А).

Для больших энергий плотность состояний такая же, как в безмассовом случае, и равна плотности состояний без иглы, уменьшенной на величину $U(0)/2\pi\hbar^2$, одинаковую для всех энергий $E > U(0) + m(0)$. В запрещенной области (для энергий $E < U(0) + m(0)$), так же, как и в случае уравнения Шредингера, плотность состояний становится экспоненциально малой. Графики плотности состояний представлены на рис. 2.

Таким образом, в случае уравнения Шредингера игла микроскопа искажает плотность состояний только для энергий, меньших величины наведенного потенциала (плотность состояний становится экспоненциально малой), а плотность состояний для больших энергий остается (в основном) неизменной (см. рис. 2). В случае уравнения Дирака игла микроскопа искажает также состояния с большими энергиями: плотность состояний уменьшается на величину $U(0)/2\pi\hbar^2$ (линейная зависимость плотности состояний от энергии “сдвигается” по оси абсцисс на величину наведенного потенциала). Кроме того, при наличии массы m экспоненциально малой становится плотность состояний с энергиями меньше $U(0) + m$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе с помощью квазиклассических асимптотик обобщенных собственных функций двумерных радиально-симметричных операторов Шредингера и Дирака исследованы локальные плотности состояний. Эти исследования позволяют оценить и сравнить эффекты влияния иглы туннельного микроскопа на получаемые при сканировании результаты измерений.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Квазиклассические асимптотики

А.1. Нормировка на дельта-функцию. Рассмотрим уравнение Шредингера (2.1). В надбарьерных состояниях асимптотика выражается через функцию Бесселя и при больших аргументах имеет вид

$$\begin{aligned}\psi &= C_\infty(E) \frac{\sqrt{T(r)}}{\sqrt{r} \sqrt[4]{E-U(r)}} J_0\left(\frac{1}{h}T(r)\right)(1+O(h)) = \\ &= C_\infty(E) \frac{1}{\sqrt{r}} \sin\left(\frac{1}{h}\sqrt{E}r + O(1)\right)(1+O(h)), \quad r \rightarrow \infty.\end{aligned}$$

Константа $C_\infty(E)$ определяется из условия (2.4) нормировки на дельта-функцию. Следуя процедуре, описанной в книге [7], рассмотрим уравнение для двух близких волновых чисел k, k_1 (где $E(k) = h^2k^2$) и применим к уравнению для k_1 комплексное сопряжение, которое обозначим звездочкой:

$$\psi_k'' + \frac{1}{r}\psi_k' + \left(k^2 - \frac{U}{h^2}\right)\psi_k = 0, \quad \psi_{k_1}^{*''} + \frac{1}{r}\psi_{k_1}^{*'} + \left(k_1^2 - \frac{U}{h^2}\right)\psi_{k_1}^* = 0.$$

Вычитая одно уравнение из другого, получим

$$(k_1^2 - k^2)r\psi_k\psi_{k_1}^* = (r\psi_{k_1}^*\psi_k' - r\psi_k\psi_{k_1}^{*'})',$$

так что

$$\iint_{\mathbb{R}^2_{xy}} \psi_k\psi_{k_1}^* dx dy = 2\pi \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R \psi_k\psi_{k_1}^* r dr = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{2\pi R}{k_1^2 - k^2} (\psi_{k_1}^*\psi_k' - \psi_k\psi_{k_1}^{*'})|_{r=R}.$$

Используя асимптотику на бесконечности и учитывая, что $\psi_k'(0) = 0$, получим

$$\int_0^R \psi_k\psi_{k_1}^* r dr = \frac{|C_\infty|^2}{2(k_1^2 - k^2)} ((k-k_1) \sin((k_1+k)R+O(1)) + (k+k_1) \sin((k_1-k)R+O(1))).$$

Рассмотрим слабый предел при $R \rightarrow \infty$:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \sin((k+k_1)R) = 0, \quad \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin(R(k-k_1))}{k-k_1} = \pi \delta(k-k_1).$$

В результате окончательно имеем

$$\lim_{R \rightarrow \infty} 2\pi \int_0^R \psi_k\psi_{k_1}^* r dr = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\pi|C_\infty|^2}{k_1 - k} \sin((k_1 - k)r + O(1)) = \pi^2 |C_\infty|^2 \delta(r),$$

откуда получаем значение нормировочной постоянной $C_\infty = 1/\pi$.

Аналогичные рассуждения справедливы для системы Дирака. Пусть $u = \psi_1\sqrt{r}$, $w = \psi_2\sqrt{r}$. Рассмотрим систему для волнового числа k и комплексно-сопряженную систему для волнового числа k_1 . Умножим первое и второе уравнения системы

для k на $-u_{k_1}^*$ и на $-w_{k_1}^*$ соответственно, а первое и второе уравнения для k_1 — на u_k и w_k , после чего сложим четыре полученных равенства. В результате получим

$$(u_k u_{k_1}^* + w_k w_{k_1}^*)(k_1 - k) = i \frac{\partial}{\partial r} (u_k w_{k_1}^* + u_{k_1}^* w_k).$$

На бесконечности справедливы следующие асимптотики:

$$\begin{aligned} \frac{u(r)}{\sqrt{r}} &= \psi_1 = \frac{C}{\sqrt{2}\sqrt{2\pi h}} \frac{\sqrt{v_+ T}}{\sqrt{rn_1}} J_0\left(\frac{T}{h}\right) (1 + O(h)) = \\ &= \frac{C}{\pi\sqrt{2}} \frac{\sqrt{v_+}}{\sqrt{rn_1}} \cos\left(\frac{T}{h} - \frac{\pi}{4}\right) (1 + O(h)), \\ \frac{w(r)}{\sqrt{r}} &= \psi_2 = \frac{n_1}{v_+} \frac{iC}{\sqrt{2}\sqrt{2\pi h}} \frac{\sqrt{v_+ T}}{\sqrt{rn_1}} J_1\left(\frac{T}{h}\right) (1 + O(h)) = \\ &= \frac{iC}{\pi\sqrt{2}} \frac{\sqrt{n_1}}{\sqrt{rv_+}} \sin\left(\frac{T}{h} - \frac{\pi}{4}\right) (1 + O(h)), \end{aligned}$$

причем $T(r)/h = (r/h)\sqrt{E^2 - m(\infty)^2} + O(1)$. Условие нормировки принимает вид

$$\begin{aligned} \delta(k - k_1) &= \iint_{\mathbb{R}_{xy}^2} \langle \Psi_k, \Psi_{k_1}^* \rangle dx dy = \iint_{\mathbb{R}_{xy}^2} (\psi_{1k} \psi_{1k_1}^* + \psi_{2k} \psi_{2k_1}^*) dx dy = \\ &= 2\pi \int_0^\infty (\psi_{1k} \psi_{1k_1}^* + \psi_{2k} \psi_{2k_1}^*) r dr = 2\pi i \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{u_k w_{k_1}^* + u_{k_1}^* w_k}{k_1 - k} = \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{C^2}{\pi(k_1 - k)} \left\{ \sqrt[4]{\frac{E + m_\infty}{E - m_\infty} \frac{E_1 - m_\infty}{E_1 + m_\infty}} \times \right. \\ &\quad \times \cos\left(\frac{r}{h} \sqrt{E^2 - m_\infty^2} + O(1)\right) \sin\left(\frac{r}{h} \sqrt{E_1^2 - m_\infty^2} + O(1)\right) - \\ &\quad - \sqrt[4]{\frac{E_1 + m_\infty}{E_1 - m_\infty} \frac{E - m_\infty}{E + m_\infty}} \times \\ &\quad \times \cos\left(\frac{r}{h} \sqrt{E_1^2 - m_\infty^2} + O(1)\right) \sin\left(\frac{r}{h} \sqrt{E^2 - m_\infty^2} + O(1)\right) \Big\} = \\ &= \frac{2C^2}{2\pi} \pi \delta(k_1 - k) \end{aligned}$$

(здесь предел также понимается в смысле слабой сходимости). Таким образом, нормировочная константа $C = 1$.

А.2. Асимптотики вблизи точек поворота и в классически запрещенной области. Для полноты изложения приведем асимптотические формулы для уравнения Дирака вблизи точек поворота и в классически запрещенной области $U(\infty) + m(\infty) < E < U(0) - m(0)$. Две точки поворота $r_+ < r_-$ определяются из уравнения $v_\pm(r_\pm) = E - U(r_\pm) \pm m(r_\pm) = 0$. Положим

$$c_2 = (U'(r_+) - m'(r_+))(E - U(r_+) - m(r_+)) > 0.$$

Пусть $l = 0$, имеем

$$\psi_1 = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{v_+ T}}{\sqrt{n_1 r}} J_0\left(\frac{1}{h} \int_{r_-}^r n_1(r) dr\right), & r > r_-, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{v_+(r_-)}}{\sqrt[6]{h c_1} \sqrt{r_-}} \text{Ai}\left((r_- - r) \frac{\sqrt[3]{c_1}}{h^{2/3}}\right), & r - r_- = O(h), \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{v_+ T}}{\sqrt{n_1 r}} \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} J_0\left(i \frac{1}{h} T(r)\right), & r_+ < r < r_-, \\ \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt[6]{h} \sqrt{-U'(r_+) + m'(r_+)}}{\sqrt[3]{c_2} \sqrt{r_+}} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} \text{Bi}'\left((r - r_+) \frac{\sqrt[3]{c_2}}{h^{2/3}}\right), & r - r_+ = O(h), \\ \frac{1}{4\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{|v_+(r)| T(r)}}{\sqrt{n_1(r)} r} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} J_0\left(\frac{1}{h} \int_0^r n_1 dr\right), & r < r_+. \end{cases}$$

Пусть $l = -1$, имеем

$$\psi_2 = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{v_- T}}{\sqrt{n_1 r}} J_0\left(\frac{1}{h} \int_{r_-}^r n_1(r) dr + \frac{\pi}{2}\right), & r > r_-, \\ -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt[6]{h} \sqrt{-U'(r_-) - m'(r_-)}}{\sqrt[3]{c_1} \sqrt{r_-}} \text{Ai}'\left((r_- - r) \frac{\sqrt[3]{c_1}}{h^{2/3}}\right), & r - r_- = O(h), \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{|v_-| T}}{\sqrt{n_1 r}} \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} J_0\left(i \frac{1}{h} T(r)\right), & r_+ < r < r_-, \\ \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{|v_-(r_+)|}}{\sqrt[6]{h c_2} \sqrt{r_+}} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} \text{Bi}\left((r - r_+) \frac{\sqrt[3]{c_2}}{h^{2/3}}\right), & r - r_+ = O(h), \\ \frac{1}{4\sqrt{\pi h}} \frac{\sqrt{|v_-(r)| T(r)}}{\sqrt{n_1(r)} r} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{h} \int_{r_+}^{r_-} |n_1| dr\right\} J_0\left(\frac{1}{h} \int_0^r n_1 dr\right), & r < r_+. \end{cases}$$

Дискретные уровни энергии $E_j^\pm$, соответствующие резонансному туннелированию, определяются из условий квантования:

$$\begin{aligned} l = 0 : \quad & \frac{1}{h} \int_0^{r_+(E_j^+)} \sqrt{(E_j^+ - U(r))^2 - m(r)^2} dr = 2\pi \left(j + \frac{1}{4}\right), \\ l = -1 : \quad & \frac{1}{h} \int_0^{r_+(E_j^-)} \sqrt{(E_j^- - U(r))^2 - m(r)^2} dr = 2\pi j \end{aligned}$$

(здесь $j \in \mathbb{N}$). Графики асимптотик представлены на рис. 3.

Рис. 3. Потенциал $U(r)$ (штрихпунктир) и функции $U(r) \pm m$ (штриховая линия) (а). Эффективный потенциал (б) для случаев $E > U(0) + m(0)$ (штрихпунктирная кривая), $U(0) - m(0) < E < U(0) + m(0)$ (штриховая кривая) и $E < U(0) - m(0)$ (сплошная кривая). Асимптотики для $\psi_1(r)$ в разном масштабе (в, д) и асимптотики для $\psi_2(r)$ (г, е) в случае 3. Вертикальные линии на графиках отмечают две точки поворота $r_{\pm}$, в которых $E - U(r_{\pm}) \pm m(r_{\pm}) = 0$.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Точное решение для квадратичного потенциала

Асимптотики (3.2), (3.3) и (3.5) справедливы при $|E - U(r)| \geq \varepsilon > 0$. Чтобы исследовать поведение плотности состояний при $E \sim U(0)$, рассмотрим задачу с потенциалом

$$U(r) = \begin{cases} U_0 - \omega^2 r^2, & r \leq r_0, \\ 0, & r \geq r_0, \end{cases} \quad r_0 = \frac{\sqrt{U_0}}{\omega}.$$

Рис. 4. Точные решения уравнения Шредингера для параболического потенциала (сплошные линии) и асимптотики для потенциала иглы (штриховые линии) при $E - U(0) = -0.05, 0.05, 0.5$ (а, б, в соответственно).

Тогда уравнение (1.1) примет вид

$$h^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + h^2 \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + ((E - U_0) + \omega^2 r^2) \psi = 0,$$

и для него известно точное решение в терминах вырожденной гипергеометрической функции Куммера¹⁾:

$$\psi(r) = \begin{cases} C e^{(i\omega/2h)r^2} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} - i\frac{E - U_0}{4h\omega}; 1; -i\frac{\omega}{h}r^2\right), & r \leq r_0, \\ \frac{\sqrt[4]{E}}{\sqrt{2\pi h}} J_0\left(\frac{1}{h}\sqrt{E}r + \theta_0\right), & r \geq r_0, \end{cases}$$

где константа C и сдвиг фазы θ_0 определяются из условия непрерывности решения и его логарифмической производной в точке r_0 :

$$\frac{\psi'}{\psi} \Big|_{r=r_0-0} = \frac{\psi'}{\psi} \Big|_{r=r_0+0}, \quad C = \frac{\psi(r_0+0)}{\psi(r_0-0)}.$$

Решение для $U_0 = u_{\text{tip}}(0)$, $\omega^2 = u''_{\text{tip}}(0)/2$ представлено на рис. 4, плотность состояний для такого потенциала в сравнении с асимптотической плотностью изображена на рис. 2. Расхождение значений точного решения и асимптотики при $r = 0$ лежит

¹⁾Вырожденные гипергеометрические функции Куммера определяются как ряд

$${}_1F_1(a; b; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k}{b_k} \frac{z^k}{k!}, \quad a_0 = b_0 = 1, \quad a_k = a(a+1) \dots (a+k-1).$$

Рис. 5. Точное решение уравнения Дирака при $E = U(0)$, $m \equiv 0$.

в пределах $O(\hbar)$. Расхождение нельзя уменьшить, вычисляя поправки к главному члену, из-за негладкости потенциала, выбранного для точного решения.

Для уравнения Дирака (для эффективного уравнения Шредингера (1.2)) приведем точное решение в случае нулевой массы и квадратичного потенциала при $E = U_0$, когда $v(r) = \omega^2 r^2$ при $r < r_0$ и $v(r) = E$ при $r \geq r_0$. В этом случае уравнение принимает вид

$$\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi_1 - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \psi_1 + \omega^4 r^4 \psi_1 = 0, \quad r \leq r_0.$$

Решение с параболическим потенциалом выражается через функцию Бесселя:

$$\psi_1(r) = \begin{cases} Cr J_{1/3} \left(\frac{\omega^2}{3\hbar} r^3 \right), & r \leq r_0, \\ \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{2\pi\hbar}} J_0 \left(\frac{1}{\hbar} Er + \theta_0 \right), & r \geq r_0. \end{cases}$$

Константа C и сдвиг фазы θ_0 определяются, как и ранее, из условия непрерывности решения и его логарифмической производной в точке r_0 . Поскольку функция $r J_{1/3}(r)$ обращается в нуль при $r = 0$, плотность состояний под иглой для $E = U(0)$ равна нулю. Решение изображено на рис. 5.

Благодарности. Авторы признательны В.Е. Назайкинскому и Т.Я. Тудоровскому за ценные дискуссии.

Список литературы

- [1] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, E. Weibel, *Appl. Phys. Lett.*, **40**:2 (1982), 178–179; *Phys. Rev. Lett.*, **49**:1 (1982), 57–61; *Physica B+C*, **109–110**:3 (1982), 2075–2077; G. Binnig, H. Rohrer, *Helv. Phys. Acta*, **55** (1982), 726–735.
- [2] J. Tersoff, D. R. Hamann, *Phys. Rev. B*, **31**:2 (1985), 805–813.
- [3] V. A. Ukraintsev, *Phys. Rev. B*, **53**:16 (1996), 11176–1185.
- [4] J. Brüning, S. Yu. Dobrokhotov, D. S. Minenkov, *Russ. J. Math. Phys.*, **21**:1 (2014), 1–8.
- [5] T. Mashoff, M. Pratzner, V. Geringer, T. J. Echtermeyer, M. C. Lemme, M. Liebmann, M. Morgenstern, *Nano Letters*, **10**:2 (2010), 461–465, arXiv:0909.0695.
- [6] С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, *Квантовая физика твердого тела*, Наука, М., 1983.

- [7] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, М., 1971.
- [8] В. М. Бабич, *Матем. сб.*, **65(107)**:4 (1964), 576–630.
- [9] M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2012.
- [10] В. П. Маслов, *Операторные методы*, Наука, М., 1973.
- [11] В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов, Т. Я. Тудоровский, *ТМФ*, **141**:2 (2004), 267–303.
- [12] В. П. Маслов, М. В. Федорюк, *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*, Наука, М., 1976.
- [13] С. Ю. Доброхотов, Г. Н. Макракис, В. Е. Назайкинский, Т. Я. Тудоровский, *ТМФ*, **177**:3 (2013), 355–386.
- [14] A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.*, **99**:24 (2007), 246802, 4 pp., arXiv: 0708.0837.

Поступила в редакцию 10.06.2015