

ФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙ

538.913

ОТ СВЕРХРЕШЕТОК К СВЕРХАТОМАМ***Е. А. Андриюшин, А. А. Быков***

Современное развитие технологии изготовления полупроводниковых материалов со сверхструктурой, безусловно, основано на достижениях физики. Но, в свою очередь, оно является одним из главных источников появления новых разделов физики полупроводников. Таким разделом можно считать мезоскопическую физику¹ — физику полупроводниковых сверхструктур промежуточных размеров. Слово «сверхструктура» означает, что в системе, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, имеется дополнительный потенциал, тоже, как правило, периодический. Характерный масштаб, период дополнительного потенциала, много больше постоянной решетки, что позволяет описывать сверхструктуру с помощью макроскопических параметров, таких, как диэлектрическая проницаемость. В то же время, указанный масштаб достаточно мал, так что существенны размерные квантовые эффекты. В полупроводниках эффективные массы квазичастиц, как правило, значительно меньше массы свободного электрона, кулоновское же взаимодействие между квазичастицами ослаблено из-за наличия диэлектрической проницаемости. В силу этого характерные энергии взаимодействия много меньше атомных энергий, а соответствующие размеры составляют $\sim 10^2$ Å. Именно такие размеры элементов полупроводниковых сверхструктур можно назвать промежуточными.

До последнего времени экспериментальные возможности ограничивали внимание физиков полупроводниковыми сверхрешетками с одномерным дополнительным потенциалом. Идея такой сверхрешетки была высказана в 1962 г. Л. В. Келдышем, который предложил модулировать периодический потенциал кристаллической решетки полупроводника мощной ультразвуковой волной². В 1970 г. Л. Есаки и Р. Цу предложили³, а затем реализовали идею композитной сверхрешетки — сверхструктуры, образованной тонкими чередующимися слоями разных полупроводниковых материалов. В 1978 г. Р. Дингл, Х. Стёрмер, А. Госсард, В. Вигман осуществили идею селективного легирования⁴ — целенаправленное помещение примесей в определенные слои сверхрешетки. В 1981 г. К. Плуг, А. Фишер, Г. Дёлер, Х. Кюнцель впервые создали легированную сверхрешетку⁵, в которой дополнительный потенциал в матрице полупроводника возникал за счет одномерного периодически чередующегося пространственного распределения доноров и акцепторов. К настоящему времени сверхрешеткам посвящено такое количество работ, что только перечисление обобщающих обзоров составит солидную библиографию. Подробный материал на эту тему можно найти в⁶⁻⁸.

В 80-х годах были предприняты первые попытки создать дополнительный потенциал сверхструктуры более сложный, чем просто одномерный. В работе⁹ впервые экспериментально реализована так называемая «нитевидная структура квантовых ям» — система полупроводниковых нитей GaAs

в матрице $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ с сечением вплоть до $200 \times 200 \text{ \AA}$. Движение носителей в такой системе имеет квазиодномерный характер. Среди результатов, представленных в самых последних работах такого рода, можно упомянуть создание «сверхрешетки» на поверхности — в инверсионном слое на поверхности раздела $\text{Si} - \text{SiO}_2$ ¹⁰, напыление слоя сверхрешетки $\text{GaAs}/\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ с регулярно меняющимся в плоскости слоя составом x ¹¹, а также изготовление двумерных массивов островков гетероструктур, так называемые «квантовые диски» с размером в плоскости $\sim 50 \text{ нм}$ ¹² и т. д.

Возможности создания тонких структур со все более уменьшающимися размерами элементов и все усложняющейся геометрией порождают идеи создания новых электронных приборов: с минимальными габаритами, увеличивающимися быстродействием, потребляющих минимальную энергию. Л. Исаки в предисловии к сборнику⁸ назвал всплеск активности в этой области «возрождением физики полупроводников».

Для формирующейся «субмикронной» электроники весьма существенной может оказаться высказанная Х. Ватанабе в 1986 г. идея «сверхатома» — квазиатомной полупроводниковой гетероструктуры¹³. В настоящей работе мы хотели бы обратить внимание на эту идею, указать на полезность применения квантовомеханических теорем для расчетов сверхатомов и кратко обсудить возможное практическое применение этих структур.

Сверхатом должен состоять из сферического ядра одного полупроводникового материала, селективно легированного донорами, окруженного беспримесной матрицей из материала с меньшей шириной запрещенной зоны. Донорные электроны стекают в матрицу, а ядро получает положительный заряд, который определяется количеством доноров Z . В зависимости от предела растворимости примеси в материале ядра при разумном диаметре ядра $d \sim 100 \text{ \AA}$ величина Z может достигать нескольких десятков и даже превосходить порядковые номера всех известных элементов таблицы Менделеева. Минимальный размер диаметра ядра, при котором применим мезоскопический подход, составляет $\sim 30 \text{ \AA}$.

Первый конкретный расчет сверхатома с ядром $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ и матрицей GaAs был проведен в работе¹⁴.

Состояние сверхатома описывается нерелятивистским уравнением Шрёдингера

$$\Psi'' + \frac{2}{r} \Psi' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Psi = 0, \quad (1)$$

где Ψ — радиальная часть волновой функции, E — энергия системы, l — орбитальное квантовое число, r — расстояние от центра ядра, \hbar — постоянная Планка, m — масса частицы. Для сверхатома m — эффективная масса электрона, которая может быть разной для материалов ядра и матрицы.

Эффективный потенциал V сверхатома, в соответствии с (1), считается сферически симметричным и имеет¹⁴ следующий вид:

$$V(r) = V_0 \cdot \theta(r_0 - r) + V_{\text{я}}(r) + V_{\text{Хартри}}(r) + V_{\text{xc}}(r); \quad (2)$$

здесь r_0 — радиус ядра, V_0 — положительный перепад минимумов зон проводимости ядра и матрицы,

$$\theta(x) = 0, \quad x < 0,$$

$$= 1, \quad x \geq 0,$$

$V_{\text{я}}(r)$ — потенциал ионизированных доноров. Потенциал Хартри $V_{\text{Хартри}}$ и обменно-корреляционный потенциал V_{xc} вычисляются на основе привычных для теории взаимодействующего электронного газа приближений. Главное отличие результирующего потенциала от потенциала, возникающего при расчетах тяжелых атомов¹⁵, состоит в следующем: диаметр ядра сверхатома сравним с общим размером сверхатома, отсутствует сингулярность в начале координат. В силу этого более выгодными оказываются уровни

энергии с большими угловыми моментами l , для которых максимум волновой функции лежит дальше от ядра, чем для s -состояний.

Расчет¹⁴, выполненный для $r_0 = 120 \text{ \AA}$ и $Z = 20$, приводит к следующей последовательности уровней $1s, 2p, 3d, \dots$, в отличие от стандартной, присущей обычным атомам последовательности $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, \dots$. Потенциал $V(r)$ для указанных значений параметров изображен на рис. 1. При изменении параметров Z и r_0 можно получать различные конфигурации уровней, скажем, при $r_0 = 120 \text{ \AA}$ основному состоянию отвечает конфигурация $1s^2 2p^6 3d^{10} 2s^2$, а при $r_0 = 170 \text{ \AA}$ — конфигурация $1s^2 2p^6 3d^{10} 2f^2$ для $Z = 20$. Радиус сверхатома, условно определяемый по максимуму радиальной волновой функции $\Psi_{2s}(r)$ состояния $2s$ ($Z = 20, r_0 = 120 \text{ \AA}$), составляет $\approx 355 \text{ \AA}$ и приблизительно в три раза превосходит радиус ядра. Разобранный пример расчета показывает, что свойства сверхатома могут весьма широко варьироваться в зависимости от вида потенциала $V(r)$, поэтому желательно представлять себе, как влияет его форма на состояние системы.

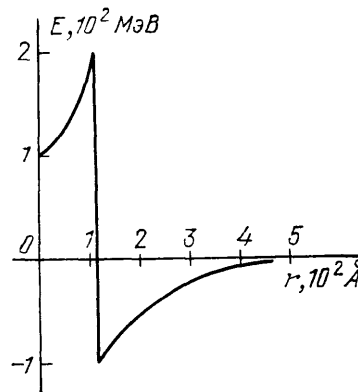


Рис. 1. Вид потенциала сверхатома, описываемого формулой (2)

Здесь мы хотим обратить внимание читателя на то, что аналогичная квантовомеханическая задача в течение значительного времени рассматривается в области физики высоких энергий. Достигнутые здесь результаты могут быть полезны для вышеописанной задачи физики полупроводников.

Проблема установления общих закономерностей расположения энергетических уровней квантовомеханической системы со сферически-симметричным потенциалом рассматривалась при изучении спектроскопии тяжелых кваркониев — связанных состояний системы кварк-антикварк. В этом случае m в формуле (1) есть приведенная масса кварка и антикварка с массами m_1 и m_2 , $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, а V — связывающий их потенциал. Естественно, что массы кварков на много порядков превосходят массы квазичастиц в полупроводниках, что определяет соответствующий масштаб энергии. Так, массы c -кварков, входящих в состав J/Ψ частиц, — связанных состояний c -кварка и c -антикварка, равны, примерно, $1,8 \text{ ГэВ}$, массы b -кварков, образующих частицы Υ -семейства, равна $\approx 5 \text{ ГэВ}$, а масса гипотетического шестого t -кварка ожидается в районе $m_t \gtrsim 45 \text{ ГэВ}$. Соответственно этому и энергии связи, и характерные расстояния, определяющие физические свойства подобных систем, имеют величины порядка $E \sim m \alpha_s^2 \sim 0,4 \text{ ГэВ}$, $r \sim (m \alpha_s)^{-1} \sim 0,1 \text{ фм}$ при $\alpha_s \approx 0,2$ и $m \approx 50 \text{ ГэВ}$. Однако приводимые ниже качественные результаты от этого не зависят.

В последние годы был доказан ряд квантовомеханических теорем¹⁶ о порядке следования уровней $E(n, l)$ с различными n и l , где n — главное квантовое число, l — орбитальный момент системы. Основным критерием, определяющим относительное расположение уровней, является кривизна потенциала относительно кривизны кулоновского потенциала

$$\Gamma_{\text{кул}} \sim \frac{1}{r} \quad (3)$$

Строго доказаны следующие теоремы:

I. В зависимости от знака $\Delta_r V$ выполняются следующие условия:

$$E(n, l-1) > E(n, l), \quad (4)$$

если

$$Y_1 = \Delta_r V = \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dV}{dr} \right) > 0, \quad \forall r > 0$$

и, наоборот,

$$E(n, l-1) < E(n, l), \quad (5)$$

если $Y_1 < 0, \forall r > 0$.

Случай $Y_1 = 0$ как раз соответствует кулоновскому потенциалу, имеющему специфическое вырождение уровней $E(n, l-1) = E(n, l)$. Примеры потенциалов, отвечающих условиям (4) и (5), приведены на рис. 2.

II.

$$E(n, l) > E(n+1, l+2) \quad (6)$$

при

$$Y_2 = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) > 0, \quad \forall r > 0,$$

и, наоборот,

$$E(n, l) < E(n+1, l+2) \quad (7)$$

при $Y_2 < 0, \forall r > 0$.

Случай $Y_2 = 0$ соответствует осцилляторному потенциалу $V_{\text{осц}} \sim r^2$, где $E(n, l) = E(n+1, l+2)$.

В рамках теории возмущений был получен еще ряд соотношений, связывающих соседние уровни, а именно,

III.

$$2E(n, l+1) \geq E(n-1, l) + E(n, l), \quad (8)$$

в зависимости от знака $Y_2 \geq 0, \forall r > 0$.

IV.

$$E(n+1, l) - E(n, l=0) \geq E(n, l=0) - E(n-1, l=0) \quad (9)$$

в зависимости от знака

$$Y_3 = \frac{d}{dr} \left[r^5 \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) \right] \geq 0$$

при $\forall r > 0$ и $\lim_{r \rightarrow 0} r^3 V = 0$.

Есть основания считать, что теорема III остается справедливой и вне рамок теории возмущений. Теорема же IV при больших величинах возмущений, нарушающих монотонность потенциала V , перестает быть справедливой.

Перечисленные результаты относятся только к потенциалам, имеющим знакоопределенные дифференциальные величины Y_i . В показанном на рис. 1 потенциале (2) присутствует особенность, которую мы будем называть θ -функциональной особенностью или просто ступенькой. В этом случае определенные выше величины Y_i меняют знак в точке $r = r_0$.

Но именно потенциал с θ -функциональной особенностью было предложено использовать для расчетов спектроскопических характеристик тяжелых кваркониев в связи с попытками рассмотрения фазовых переходов при учете динамической природы массы кварков¹⁷. При этом влияние параметров ступеньки на уровни энергии и волновые функции системы можно исследовать либо с помощью методов теории возмущений, либо с помощью численных методов. Мы рассмотрим примеры применения обоих способов.

В работе¹⁸ в рамках теории возмущений были проведены расчеты для модельного потенциала

$$V_1(r) = -\frac{B}{r} - V_0 \theta(r_0 - r). \quad (10)$$

Вид потенциала V_I показан на рис. 3. Следует заметить, что знак ступеньки в потенциале V_I противоположен ее знаку в потенциале (2), однако в рамках теории возмущений все сдвиги уровней пропорциональны V_0 , что и определяет их знак. Противоположные случаи (2) и (10) соответствуют введению в исходный потенциал «кора» или «ямы» вокруг начала координат.

Сдвиг разностей энергий уровней 2s и 1s для потенциала (10) определяется формулой

$$\Delta(E_{2s} - E_{1s}) = \frac{3}{8} + V_0 e^{-r_0} \left[1 + r_0 + \frac{r_0^2}{2} + \frac{r_0^4}{8} - e^{-r_0} (1 + 2r_0 + 2r_0^2) \right], \quad (11)$$

где введены кулоновские единицы и r_0 измеряется в боровских радиусах

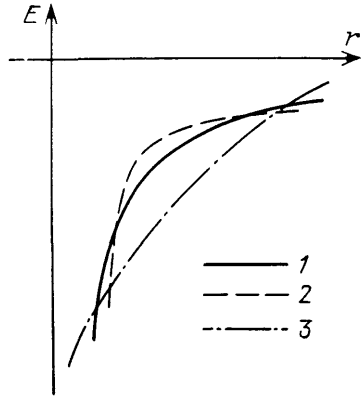


Рис. 2. Сравнительный вид кулоновского потенциала (1), потенциала, удовлетворяющего условию (4) (2), и потенциала, удовлетворяющего противоположному условию (3)

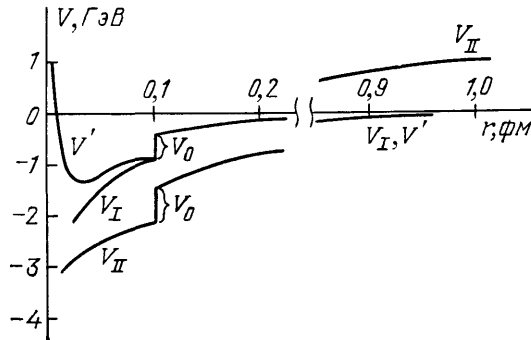


Рис. 3. Графики потенциала (10) V_I , потенциала (13) V' и потенциала V_{II} , используемого при расчете свойств тяжелых кваркониев

$a_{\text{Бор}} = \hbar^2/mB$. Величина (11) всегда положительна и имеет максимум в области $r_0 \sim 2$. Следовательно, для потенциала (10) при введении θ -особенности разница между уровнями 2s и 1s всегда увеличивается, а для случая сверхатома (2) — уменьшается.

Более сложной и интересной для нас зависимостью характеризуется расщепление уровней 2s и 2p в потенциале (10):

$$\Delta(E_{2s} - E_{2p}) = \frac{V_0}{12} r_0^3 (r_0 - 2) e^{-r_0}. \quad (12)$$

При $r_0 = 2$ сохраняется кулоновское вырождение $E_{2s} = E_{2p}$. При $r_0 < 2$ уровень 2s лежит ниже, чем уровень 2p. Но для сверхатома, при отрицательном V_0 в том же случае достаточно малых r_0 ниже оказывается уровень 2p. График зависимости (12) приведен на рис. 4.

В этом месте у читателя может возникнуть законный вопрос, а не противоречит ли этот вывод результатам работы¹⁴ (см. с. 125 этой статьи), где получено, что при увеличении размеров сверхатома более выгодным становится не s-, а f-состояние электрона? Отметим, что цитируемые нами аналитические результаты относятся к p-состояниям. Выводы же, касающиеся f-состояний, требуют дополнительного анализа. Кроме того, применение теории возмущений по параметру V_0 в этом случае представляется неправомерным, так как величина V_0 того же порядка, что и значение самого потенциала V^*).

В более сложном модельном потенциале

$$V'(r) = -\frac{B}{r} + \frac{A}{r^2} - V_0 \theta(r_0 - r) \quad (13)$$

*) Одним из авторов (Е.А.) было проверено, что в рамках теории возмущений для потенциала (10) порядок заполнения уровней s и f соответствует порядку, приводимому на с. 125 настоящей статьи.

расщепление уровней $2s$ и $2p$ описывается формулой¹⁸

$$E_{2s} - E_{2p} = \frac{AB^2m^2}{6\hbar^4} + \frac{V_0}{12} \left[r_0^3(r_0 - 2)e^{-r_0} - 32 \frac{mA}{\hbar^2} E_1(-r_0) + \right. \\ \left. + \frac{4mA}{3\hbar^2} e^{-r_0} \left(r_0^5 - \frac{34}{3} r_0^4 + \frac{11}{3} r_0^3 - 18r_0^2 - 24r_0 \right) + \right. \\ \left. + \frac{8mA}{3\hbar^2} e^{-r_0} (C + \ln r_0) (2r_0^4 - r_0^3 + 6r_0^2 + 12r_0 + 12) \right], \quad (14)$$

где C — постоянная Эйлера, $E_1(x)$ — интегральная показательная функция.

Второй член в потенциале (13) представляет собой отталкивательный кор в начале координат. Он вносит в расщепление (14) положительный постоянный вклад $AB^2m^2/6\hbar^4$, кроме того, нуль зависимости (14) сдвигается в

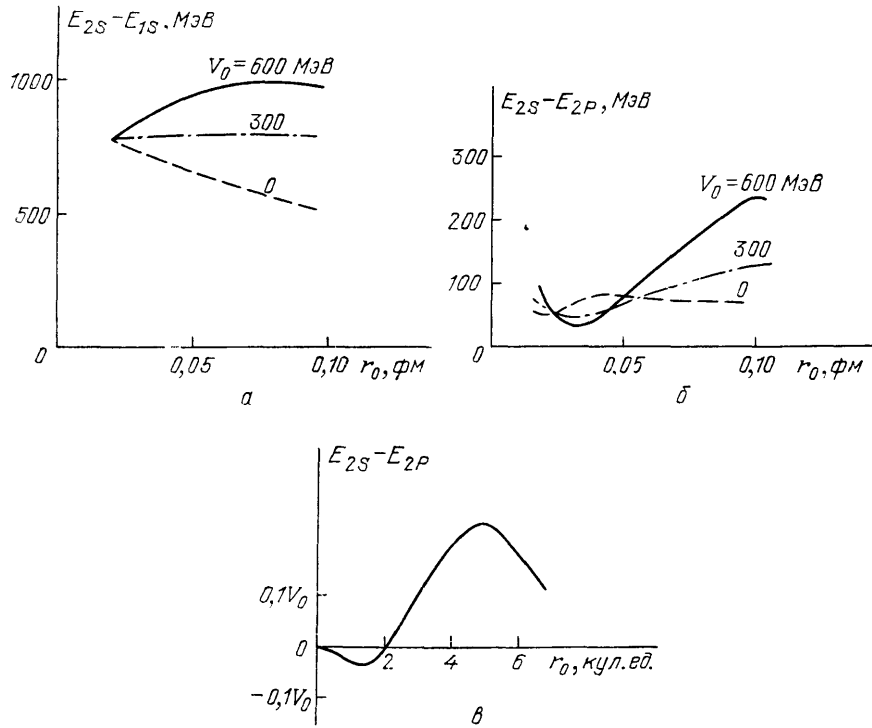


Рис. 4. Расщепление уровней энергии $E_{2s} - E_{1s}$ (а), $E_{2s} - E_{2p}$ (б) в потенциале V_{II} и $E_{2s} - E_{2p}$ в потенциале (10) (в)

сторону больших значений $r_0 > 2$. Качественно зависимость (14) походит на зависимость (12) и переходит в нее при $A = 0$. Таким образом, и на потенциале (13) мы видим, что кор в начале координат делает относительно более выгодным уровень $2p$.

Были проведены также численные расчеты с потенциалом V_{II} , который изображен на рис. 3. Этот потенциал значительно более реалистичен для задачи кваркония, чем модельные потенциалы V_I и V' , с которыми можно работать в рамках теории возмущений. Этот потенциал обладает следующим характерным поведением: $V_{II}(r) \sim 1/r \ln(\Lambda r)$ при $r \rightarrow 0$ и $V_{II}(r) \sim ar$ при $r \rightarrow \infty$, где $\Lambda = 0,1$ ГэВ и $a \approx 0,2$ ГэВ² — некоторые размерные параметры. В точке сшивки двух асимптот r_0 имеется θ -функциональная особенность, отражающая наличие фазового перехода¹⁹, отвечающего переходу из кирально-симметричной фазы в фазу, этой симметрией не обладающую.

Расщепление $2s-1s$ уровней в этом потенциале определяется, главным образом, положением и высотой ступеньки (система «заперта» в узкой и глу-

бокой потенциальной яме. Расщепление $ns - (n - 1)s$ уровней определяется шириной ямы, а ее глубина задает число примерно эквидистантно расположенных уровней). Расщепление $2s - 1s$ уровней обладает следующим асимптотическим поведением. При $r_0 \rightarrow 0$ независимо от величины ступеньки V_0 оно стремится к значениям, типичным для гладкого потенциала кваркониев $E_{2s} - E_{1s} \approx 700 \div 800$ МэВ ²⁰ при $m_q \approx 45$ ГэВ. При больших r_0 скорость наступления асимптотики, отвечающей пределу $r_0 \rightarrow \infty$, существенно зависит от величины ступеньки. При $V_0 = 0$ в области потенциала, определяющей свойства низколежащих связанных состояний, основную роль играет «мягкая», пропорциональная $1/r \ln(\Delta r)$ часть потенциала взаимодействия, и поэтому $E_{2s} - E_{1s}$ стремится к значениям, характерным для потенциалов такого вида $E_{2s} - E_{1s} \approx 550$ МэВ. При $V_0 = 600$ МэВ подобная асимптотика наступает значительно позже, так как $2s$ -состояние имеет среднеквадратичный радиус $\langle r^2 \rangle_{2s}^{1/2} \approx 0,17$ фм при $m_q = 45$ ГэВ и «выталкивается» ступенькой к большим значениям E_s .

Более сложной зависимостью характеризуется расщепление $2s - 2p$ уровней в потенциале V_{II} . В этом случае, как и для $2s - 1s$ -состояний, расщепление уровней энергии является убывающей функцией высоты ступеньки V_0 . Однако поведение расщепления, как функция положения r_0 θ -функциональной особенности потенциала, не является монотонным. В пределе $r_0 \rightarrow 0$ (потенциал гладкий) мы получаем расщепления, характерные для обычно применяемых в спектроскопии кваркониев потенциалов $\Delta(E_{2s} - E_{2p}) = 800$ МэВ при $m_q = 45$ ГэВ. На графиках, представленных на рис. 4, этот предел еще не наступил. В пределе же $r_0 \rightarrow \infty$ расщепление $2s - 2p$ уровней, так же как и расщепление $2s - 1s$ уровней, стремится к значениям, характерным для потенциала $V \sim 1/(r \ln \Delta r)$, $E_{2s} - E_{1p} \approx 130$ МэВ, так как в этом пределе среднеквадратичные радиусы связанных состояний $\langle r^2 \rangle^{1/2} < r_0$, и основную роль играет именно эта асимптотика потенциала. Скорость же достижения асимптотических значений разности $E_{2s} - E_{2p}$ по тем же причинам, что и в случае $2s - 1s$ -уровней, сильно зависит от высоты V_0 θ -функциональной особенности, и при $V_0 = 600$ МэВ она оказывается значительно ниже, чем при $V_0 = 0$. Значения $\Delta(E_{2s} - E_{2p})$ при промежуточных r_0 представляют собой знакопеременную функцию. График этой зависимости представлен на рис. 4. Очевидно, что количественные отличия результатов, представленных на этих рисунках, связаны с применением для получения аналитических выражений модельных потенциалов и методов теории возмущений, справедливых в этой задаче далеко не во всех областях пространства.

Интересно рассмотреть также поведение волновой функции системы в начале координат. Из теоремы вириала квантовой механики, которая гласит, что среднее значение кинетической энергии связано с градиентом потенциала следующим образом:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \left\langle r \frac{dV}{dr} \right\rangle, \quad (15)$$

следует также, что

$$|\Psi(0)|^2 \sim \left\langle m \frac{dV}{dr} \right\rangle. \quad (16)$$

Таким образом, θ -функциональная особенность в потенциале увеличивает $|\Psi(0)|^2$ на величину

$$\Delta |\Psi(0)|^2 = m |\Psi(r_0)|^2 r_0^2 V_0. \quad (17)$$

При наличии θ -функциональной особенности могут значительно измениться (по сравнению со случаем гладкого потенциала) отношения:

$$\frac{|\Psi(0)|_{n,l}^2}{|\Psi(0)|_{n+1,l}^2} \sim \frac{\langle dV/dr \rangle_{n,l}}{\langle dV/dr \rangle_{n+1,l}},$$

особенно при малых n и больших массах кварков. Это очевидно, так как при малых n часть уровней лежит левее ступеньки (среднеквадратичный радиус этих состояний меньше r_0), а другие уровни выходят за ее пределы (их среднеквадратичный радиус больше r_0). Расчет показывает, что при $m_q \approx 45$ ГэВ $|\Psi(0)|_{2s}^2/|\Psi(0)|_{1s}^2 \approx 0,5 - 0,6$, что вдвое больше «стандартного» значения $|\Psi(0)|_{2s}^2/|\Psi(0)|_{1s}^2 \approx 0,25 - 0,3$, получаемого при использовании гладких потенциалов.

Результаты численного анализа поведения $|\Psi(0)|^2$ для потенциала V_{II} в зависимости от положения r_0 θ -особенности и ее величины представлены

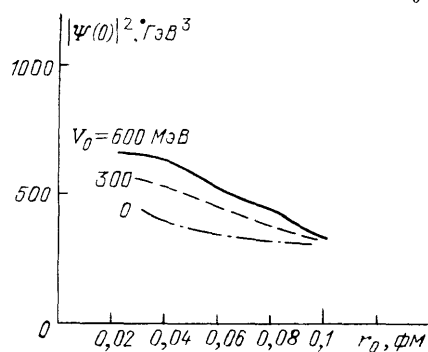


Рис. 5. Зависимость $|\Psi(0)|_{1s}^2$ от положения θ -функциональной особенности потенциала V_{II}

на рис. 5, откуда видно, что зависимость $|\Psi(0)|^2$ от параметров V_0 , r_0 практически монотонная.

Сделаем еще одно замечание, касающееся абсолютных значений уровней энергии в потенциале со ступенькой как функции массы частиц. Согласно теореме Фейнмана, справедливо следующее соотношение

$$\frac{\partial E}{\partial m} \sim \left\langle r \frac{dV}{dr} \right\rangle.$$

Наличие θ -особенности в потенциале взаимодействия приводит к усилению зависимости энергии системы от массы частиц (см. потенциалы V_I , V_{II} рис. 3). В случае противоположного знака ступеньки (см. потенциал (2) сверхатома) зависимость энергии от массы ослабляется. Можно ожидать, что в спектроскопии кваркониев удастся экспериментально измерить отношения

$$\frac{(\partial E / \partial m)_{2s}}{(\partial E / \partial m)_{1s}} \sim \frac{\langle r dV/dr \rangle_{2s}}{\langle r dV/dr \rangle_{1s}}$$

для первых двух уровней в семействах чармония, боттомония и топония и тем самым, как и по величине отношения $|\Psi(0)|_{2s}^2/|\Psi(0)|_{1s}^2$, судить о положении и величине θ -функциональной особенности потенциала.

Будущие эксперименты на вступающих в строй в 1987—1990 гг. e^+e^- -ускорителях SLC и LEP, по-видимому, дадут возможность провести детальное исследование спектроскопических характеристик частиц семейства топония. На основе этих данных можно будет уточнить поведение потенциала взаимодействия кварк-антикварк на расстояниях $< 0,1$ фм и получить информацию о динамическом поведении масс кварков. Причем для этого было бы достаточно знать расщепления $2s - 1s$ и $2s - 2p$ уровней с точностью ~ 100 МэВ (при определении уровней боттомония точность составляет $\sim 0,5$ МэВ), а также отношение $|\Psi(0)|_{2s}^2/|\Psi(0)|_{1s}^2$ с точностью $\sim 0,10 - 0,15$. (Аналогичная точность для боттомония составляет на сегодняшний день 0,08.)

Обсужденные выше общие теоремы и их применение к системе кваркония могут при соответствующем изменении масштаба оказаться весьма полезными и для понимания свойств сверхатомов. Поэтому мы изложили их здесь столь подробно.

Вернемся теперь к перспективам моделирования систем со сферически симметричным потенциалом в физике твердого тела. Любопытно, что в последнее время задача (1) получила здесь еще одно применение. В работе²¹ было экспериментально получено распределение масс кластеров атомов Na. В области размеров кластеров от 4 до 100 атомов Na на кластер были обнаружены главные максимумы распределения для $N = 8, 20, 40, 58$ и 92. В связи с этим была выдвинута идея, что кластер напоминает гигантский атом, а указанные числа соответствуют его полностью заполненным оболоч-

кам. Эта идея подтверждается расчетом²², в котором также решается уравнение (1) с неким усредненным потенциалом с учетом экранирования заряда кластера электронами и взаимодействия электронов. Вообще говоря, кластер лишь условно можно уподобить ядру атома, поскольку ионы кластера значительно менее подвижны, чем нуклоны в ядре. Кроме того, размеры кластера значительно больше по отношению к размерам всей системы. Однако для щелочных металлов поле ионов хорошо экранируется валентными электронами. Выбирая процедуру усреднения, потенциал можно считать сферически симметричным, а геометрическую структуру кластера учитывать как возмущение²².

Результирующий потенциал отличается от потенциала (2) отсутствием первого члена, резкой ступеньки, однако дифференциальные величины Y_i для него также знакопеременны, а полученная последовательность уровней 1s, 2p, 3d, 2s имеет тот же вид, что и для сверхатома. Современные технологические возможности, по-видимому, позволяют получить металлические кластеры, характеризующиеся еще более сложным видом потенциала $V(r)$ ²³.

Итак, если идея сверхатома будет реализована, будет возможно создавать системы со сферически симметричным потенциалом весьма разнообразного характера и различными свойствами. Электроны в сверхатоме оказываются связанными на хорошо определенных атомных орбиталях и локализованными вблизи изготовленного искусственно ядра. Энергия ионизации сверхатома составляет ~ 1 мэВ, что позволяет менять его состояние с помощью весьма малых полей. Видимо, возможно будет построение сверхмолекул, кластеров сверхатомов и даже сверхкристаллов. При этом «сверхкристаллическую решетку» можно будет задавать по желанию, управляя ее периодом и симметрией. Это открывает возможность изучения неустойчивости электронной подсистемы, когда перестройка решетки невозможна. Таким способом можно моделировать и исследовать физические эффекты, которые сложно реализовать в природных твердых телах, например, вигнеровскую кристаллизацию электронного газа малой плотности.

Свойства самих сверхатомов могут быть столь же разнообразны, сколь разнообразны полупроводниковые материалы. В весьма широких пределах может меняться величина ступеньки V_0 и масса квазичастиц. Возможно также существование сверхантиатома¹³, в котором ядро будет легировано акцепторами и иметь отрицательный заряд, а связанными квазичастицами будут дырки. Интересные применения могут быть у сверхатомов со всеми незаполненными оболочками, кроме первой, и с максимальным орбитальным моментом. Высказана идея создания счетчика одиночных электронов, которым может служить ионизованный сверхатом²⁴. В работе¹³ обсуждается возможность создания ячеек памяти на основе массивов сверхатомов.

Мы надеемся, что настоящая статья поможет привлечь большее внимание к описанным физическим явлениям.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schwarzschild B. // Phys. Today. 1986. V. 39, No. 1. P. 17.
2. Келдыш Л. В. // ФТТ. 1962. Т. 4. С. 2265.
3. Esaki L., Tsu R. // IBM J. Res. and Develop. 1970. V. 14. P. 61.
4. Dingle R. et al. // Appl. Phys. Lett. 1978. V. 33. P. 665.
5. Plog K. et al. // Gallium Arsenide and Related Compounds 1980/Ed. H. W. Thim. — London, 1981. — (Institute of Physics Conference Series. No. 56).
6. Two-Dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices/Ed. G. Baker, F. Kuchar, H. Heinrich. — Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer-Verlag, 1984. — (Springer Series on Solid-State Sciences. V. 53).
7. Силин А. П. // УФН. 1985. Т. 147. С. 485.
8. Heterojunctions and Semiconducting Superlattices; Proc. of the Winter School. Les Houches, France, March 12—21, 1985/Ed. G. Allan. — Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo; London; Paris: Springer-Verlag, 1986.

9. Petroff P. M. et al.//Appl. Phys. Lett. 1982. V. 41. P. 635.
10. Warren A. C. et al.//IEEE Electron. Device Lett. 1985. V. 6. P. 294.
11. Bedair S. M., Tischler M. A., Katsuyama T.//Appl. Phys. Lett. 1986. V. 48. P. 30.
12. Scherer A., Craighead H. G.//Ibidem. V. 49. P. 1284.
13. Watanabe H., Inoshita T.//Optoelectron. Device Technol. 1986. V. 1. P. 33.
14. Ioshita T., Ohnishi S., Oshiyama A.//Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. P. 2560.
15. См., например: Методы расчета электронной структуры атомов и молекул/Под ред. М. Г. Веселова.— Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1976.
16. См., например: Martin A. CERN preprint CERN-TH. 4676/87.— Geneva, 1987.
17. Быков А. А., Дремин И. М.//ЯФ. 1986. Т. 44. С. 1542.
18. Дремин И. И.//Кр. сообщ. физ., ФИАН СССР. 1987. № 1. С. 45.
19. См., например: Kovacs E. V. E., Sinelair D. K., Kogut J. B.//Preprint ANL-HEP-PR-86-137.— 1986.
20. Gupta S. N., Radford S. F., Repko W. W.//Phys. Rev. Ser. D. 1986. V. 34. P. 201.
21. Knight W. D. et al.//Phys. Rev. Lett. 1984. V. 52. P. 2141.
22. Ishii Y., Ohnishi S., Sugano S.//Phys. Rev. Ser. B. 1986. V. 33. P. 5271.
23. Ekardt W.//Ibidem. V. 34. P. 526.
24. Сплин А. П.//ФТТ. 1987.