

О граничных условиях для волновой функции частиц с двухдолинным дираковским спектром

© Р.З. Витлина, Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик

Институт физики полупроводников СО РАН им. А.В. Ржанова,
Новосибирск, Россия

E-mail: levvm@isp.nsc.ru, chaplik@isp.nsc.ru

Поступила в Редакцию 3 сентября 2026 г.

В окончательной редакции 3 сентября 2026 г.

Принята к публикации 4 сентября 2026 г.

Общие требования эрмитовости и отсутствия вытекающих токов не обеспечивают однозначность выбора граничных условий на двухкомпонентную волновую функцию частицы в системе с дираковским спектром. Рассчитаны два эффекта, одночастичный и связанный с коллективными возбуждениями, при двух разных граничных условиях и показана принципиальная возможность экспериментально установить какие граничные условия реализуются в исследуемом образце.

Ключевые слова: двухкомпонентная волновая функция частицы, граничные условия.

DOI: 10.61011/FTT.2026.09.63921.10599

1. Введение

Вопрос о граничных условиях (ГУ) для многокомпонентной волновой функции электронов в твердых телах неоднократно обсуждался в литературе. В последние годы эта проблема часто возникает в связи с исследованием объектов с двухдолинным дираковским спектром. Наноструктуры на основе монослоя дихалькогенидов переходных металлов (ДХПМ) (квантовые проволоки, кольца, точки) обычно описываются минимальной двухзонной моделью, предложенной Xiao et al. [1], с использованием ГУ Берри–Мондрагона [2]. После этих базовых работ в литературе появилось большое число публикаций, посвященных проблеме ГУ для наноструктур графена и монослоев ДХПМ [3–10]. В цитированных работах применяются различные методы вывода ГУ, учитываются спин-орбитальные расщепления зон, а также возможность междолинных переходов из-за взаимодействия электронов с границей образца. Полученные ГУ дают линейную связь между двумя компонентами спинорной волновой функции и обеспечивают выполнение двух непереносных и очевидных требований: эрмитовость гамильтониана внутри образца и отсутствие выходящего тока частиц в любой точке его границы. Однако простейшие ГУ— обращение в нуль на границе одной (любой) из компонент спинорной волновой функции — точно также обеспечивает эрмитовость и отсутствие вытекающего тока на границе.

Таким образом, возникает вопрос о выборе ГУ. Заметим, что в указанных выше работах не рассматривается какой-либо пример физического эффекта, рассчитанного при разных ГУ и дающего возможность оценить возникающую разницу результатов.

В предложенном сообщении мы исследуем эту проблему на примере примесных состояний электронов в

случае примесного центра, расположенного вблизи края квазиодномерной структуры монослоя ДХПМ (квантовая проволока), а также в случае плазменных колебаний в полосе ДХПМ конечной ширины. Будет показано, что энергия связи электрона на примесном центре различна для двух упомянутых ГУ, причем различие, естественно, возрастает с уменьшением расстояния от примеси до края структуры. Так как совокупность таких локализованных состояний образует примесную зону, то границы ее оказываются изогнутыми вблизи края проволоки, причем положение точки слияния примесной зоны с зоной проводимости (или валентной зоной) оказывается различным для разных ГУ. В случае плазмонов различной оказывается скорость „звука“ в акустической ветви междолинного плазмона. Описанные эффекты открывают принципиальную возможность выяснить экспериментально, какое ГУ „предпочитает“ природа.

2. Квантовая проволока

В безграничной одномерной системе короткодействующий потенциал малой глубины $U(x)$, $U < 0$, создает локализованное состояние с энергией связи ε , где

$$\varepsilon = \frac{m}{2} V_0^2; \quad V_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx U(x); \quad \hbar = 1, \quad (1)$$

m — эффективная масса частицы, закон дисперсии которой предполагается стандартным $E = p^2/(2m)$.

Если 1D система полубесконечна $0 < x < \infty$, а примесь расположена при $x = a$, то нетрудно получить уравнение, определяющее ε при той же связи E и p . В этом случае ГУ очевидно имеет вид $\psi(0) = 0$, и тогда

получаем:

$$\varepsilon = \frac{k^2}{2m}; \quad k = mV_0(1 - e^{-2ka}). \quad (2)$$

Кроме тривиального корня $k = 0$ уравнение (2) имеет решение, зависящее от a . При $a \rightarrow \infty$ это решение совпадает с (1), а при уменьшении расстояния до края примесный уровень выталкивается из потенциальной ямы и исчезает при $a = a_c = 1/(2mV_0)$.

Перейдем теперь к квантовой проволоке ДХПМ. Исходная система уравнений в модели [1] имеет вид:

$$\left(\frac{\Delta}{2} - E + U(x)\right)\psi_1(x) - i\gamma\tau\psi_2'(x) = 0, \quad (3)$$

$$i\gamma\tau\psi_1'(x) + \left(\frac{\Delta}{2} + E - U(x)\right)\psi_2(x) = 0, \quad (4)$$

где Δ — ширина запрещенной зоны, γ — межзонная скорость, $\tau = \pm 1$ — долинный индекс, штрих означает производную по x . Мы будем считать, как и выше, потенциал $U(x)$ мелкой ямой ($|U| \ll \Delta$); такому же неравенству удовлетворяет расстояние примесного уровня E_0 от дна зоны проводимости, т.е. $\varepsilon = \Delta/2 - E_0 \ll \Delta$. Тогда система уравнений (3) и (4) упрощается:

$$\begin{aligned} (\varepsilon + U(x))\psi_1(x) - i\gamma\tau\psi_2'(x) &= 0, \\ i\gamma\tau\psi_1'(x) + \Delta\psi_2(x) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Подставляя ψ_2 из второго уравнения в первое, получаем для ψ_1 :

$$\psi_1''(x) - \frac{\Delta(\varepsilon + U(x))}{\gamma^2}\psi_1(x) = 0. \quad (6)$$

Теперь, решая уравнение (6), можно выяснить, как ГУ влияют на положение примесного уровня. При любом ГУ функцию ψ_1 внутри ямы можно заменить постоянной, величину ε в этой же области можно опустить, считая уровень мелким $\varepsilon \ll |U|$, что подтверждается результатом. Вне радиуса действия потенциала $\psi_1(x)$ имеет вид экспонент $e^{\pm kx}$, где $k^2 = \Delta\varepsilon/\gamma^2$. В промежутке $0 < x < a$ $\psi_1(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$, а при $x > a$ $\psi_1(x) \propto e^{-kx}$. Несложные выкладки приводят к уравнениям относительно k :

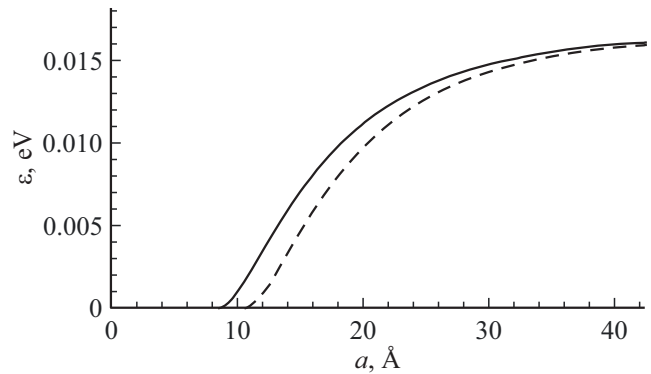
для нулевых ГУ ($\psi_1(0) = 0$)

$$k = \frac{\Delta V_0}{2\gamma^2} (1 - e^{-2ka}); \quad (7)$$

для ГУ Берри–Мондрагона ($\psi_1(0) = i\tau\psi_1(0)$)

$$k = \frac{\Delta V_0}{2\gamma^2} (1 - \lambda(k)e^{-2ka}), \quad \lambda(k) = \frac{\Delta - k\gamma}{\Delta + k\gamma}. \quad (8)$$

Смена знака величины $\lambda(k)$ при $\Delta = k\gamma$ соответствует значению k , при котором $\varepsilon = \Delta$. Это противоречит приближению мелкого уровня, в котором решалась задача. Так что в пределах применимости проведенных вычислений $1 > \lambda(k) > 0$. Мы видим, что энергии связи



Энергии связи для 1D системы при различных ГУ. Сплошная линия для БМ ГУ, пунктирная — для нулевых ГУ.

для разных ГУ различны. Различны также и критические значения a , при которых связанное состояние исчезает, т.е. уровень выталкивается из ямы под влиянием близости границы образца. Для нулевых ГУ $a_{c0} = \gamma^2/(\Delta V_0)$, а для Берри–Мондрагоновских ГУ $a_{cB} = \gamma^2/(\Delta V_0) - \gamma/\Delta$.

Как видим, разность положений точек выхода уровня в континуум γ/Δ для двух рассматриваемых ГУ оказывается универсальной в том смысле, что зависит только от материала и не содержит параметров потенциальной ямы. Это объясняется тем, что в малой окрестности точки выхода всякий уровень становится мелким по самому определению этой точки, и условия применимости сделанных приближений выполняются автоматически. Подчеркнем, что найденные значения положений критических точек являются точными следствиями уравнений на спектр (7) и (8), и при их получении никаких дополнительных к уже принятым приближениям не делалось. Отношение же координат точек выхода стремится к единице с уменьшением V_0 .

Полученные численно кривые $\varepsilon(a)$ для двух типов ГУ приведены на рисунке. Выбранные параметры материала соответствуют MoS_2 : $\Delta = 1.66$ еВ, $\gamma = 3.51$ еВ Å. Потенциал характеризуется параметром V_0 , который для расчета выбран равным 0.2γ . Положения точек выхода уровня в континуум: $a_{c0} = 10.57$ Å, $a_{cB} = 8.46$ Å.

В заключении этого раздела заметим, что формулы (7) и (8) не содержат индекса τ , и примесный уровень, таким образом, дважды вырожден.

3. О влиянии ГУ на спектр междолинного плазмона

Перейдем теперь к вопросу о влиянии ГУ для волновой функции электрона на спектр коллективных возбуждений электронного газа. Мы рассмотрим этот вопрос на примере плазменных колебаний в полосе монослоя ДХПМ. Как будет показано, различие между двумя типами ГУ оказывает существенно большее влияние на спектр коллективных колебаний, чем на спектр одночастичных состояний, который рассмотрен в предыдущем

разделе. Поставленная задача решена в работе [11] на примере ГУ Берри–Мондрагона. Показано, что при заселении лишь нижнего уровня размерного квантования в полосе спектр плазменных колебаний содержит две ветви, частоты которых обращаются в нуль при нулевом векторе k (внутриподзонные плазмоны). Одна из них, называемая оптическая, имеет сингулярность при $k \rightarrow 0$ $\omega_{\text{opt}} \propto \sqrt{\ln(kw)}$, где w — полуширина полосы. Частота второй ветви, акустической, линейно обращается в нуль $\omega_{\text{ac}} \propto sk$ (s — скорость звука). В длинноволновом пределе $k \ll p_F$ формулы для частот имеют вид:

$$\omega_{\text{opt}}^2 = k^2[v_F^2 + 2\beta v_F(J_1 + J_2)]; \quad (9)$$

$$\omega_{\text{ac}}^2 = k^2[v_F^2 + 2\beta v_F(J_1 - J_2)], \quad (10)$$

где v_F — скорость Ферми электронов нижней подзоны, равная $v_F = \pi N_L / (4m)$, N_L — линейная концентрация, $m = \Delta / (2\gamma^2)$ — эффективная масса в ДХПМ, $\beta = e^2 / (\pi\epsilon)$, ϵ — средняя диэлектрическая постоянная двух сред, разделенных 2D электронным газом.

Величины J_1, J_2 (форм-факторы) определяются собственными функциями электронов в полосе в модели [1]:

$$J_1 = \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' |\psi_+(x, p_F)|^2 K_0(|k(x - x')|) |\psi_+(x', p_F)|^2; \quad (11)$$

$$J_2 = \int_{-w}^w \int_{-w}^w dx dx' |\psi_+(x, p_F)|^2 K_0(|k(x - x')|) |\psi_-(x', p_F)|^2. \quad (12)$$

Здесь $|\psi_+|^2$ и $|\psi_-|^2$ — скалярные квадраты нормированных спиноров (т.е., сумма квадратов модулей ψ_1 и ψ_2) в долинах $\tau = +1$ и $\tau = -1$ соответственно; K_0 — функция Макдональда.

Наиболее существенное различие двух типов ГУ проявляется в акустической ветви, причем ключевым является множитель $J_1 - J_2$ в формуле (10). Проведем оценку разности $J_1 - J_2$ при нулевых ГУ и для плазмонов нижней подзоны. В этом случае собственная функция электрона имеет вид:

$$\psi_1(x) = N \cos(\kappa x);$$

$$\psi_2(x) = N \frac{i\gamma}{E + d} (p \cos(\kappa x) + \tau \kappa \sin(\kappa x)), \quad (13)$$

где N — нормирующий множитель, p — импульс электрона вдоль полосы, $\kappa = \pi / (2w)$, $-w < x < w$, $d = \Delta / 2$, $E^2 = \gamma^2(p^2 + \kappa^2)$. При ширине полосы $2w \sim 10 \text{ nm}$ и линейной концентрации $N_L \sim 10^6 - 10^7 \text{ cm}^{-1}$ энергия нижней подзоны близка к дну зоны проводимости (или толчку валентной зоны), т.е. $|E| \approx d$. При этом оба параметра $\gamma N_L / \Delta$ и $\gamma / (dw)$ малы: $\gamma p / \Delta \ll 1$ и $\gamma / (dw) \ll 1$, т.е. вторая компонента спинора (13) мала по сравнению с первой, $|\psi_2| \ll |\psi_1|$.

Искомая разность форм-факторов дается интегралом

$$J_1 - J_2 = \int_{-w}^w dx \int_{-w}^w dx' |\psi_+(x)|^2 K_0(|k(x - x')|) \times [|\psi_+(x')|^2 - |\psi_-(x')|^2].$$

Результат имеет вид:

$$J_1 - J_2 = \int_{-w}^w \frac{dx}{w} \int_{-w}^w \frac{dx'}{w} \times \left\{ \left[\cos\left(\frac{\pi x}{2w}\right)^2 + r w^2 \left(p \cos\left(\frac{\pi x}{2w}\right) + \kappa \sin\left(\frac{\pi x}{2w}\right) \right)^2 \right] \times r p w \pi \sin\left(\frac{\pi x'}{w}\right) \ln\left(\frac{w}{|k(x - x')|}\right) \right\}. \quad (14)$$

При получении (14) сделана замена κ на $\pi / (2w)$, E и N на приближенные значения $E \rightarrow d$, $N \rightarrow 1 / \sqrt{w}$ и введено обозначение $r = (\gamma / (dw))^2$. Таким образом, главный член (линейный по r) в (14) обращается в нуль, так как он меняет знак при инверсии в плоскости интегрирования x, x' . Аналогичные вычисления в случае ГУ Берри–Мондрагона показывают, что главный член разложения имеет порядок $r^{3/2}$. Именно этот вклад определяет скорость акустического плазмона в случае ГУ Берри–Мондрагона (см. работу [11]) так как при таких ГУ $\psi_1(x)$ не является четной функцией. Здесь же $J_1 - J_2$ оказывается величиной порядка r^2 , т.е. скорость акустического плазмона получается на 1–1.5 порядка меньше, и вряд ли обнаружима экспериментально из-за ничтожного превышения над v_F .

4. Заключение

Таким образом, мы показали, что два ГУ, оба удовлетворяющие общим принципам эрмитовости и отсутствия вытекающих токов, приводят к разным результатам как в одноэлектронном спектре, так и в дисперсии междолинных плазмонов в монослое ДХПМ. В последнем случае различаются даже порядки величин.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, W. Yao. Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).
- [2] M.V. Berry, R.J. Mondragon. Proc. R. Soc. London, Ser. A **412**, 53 (1987).
- [3] D. Oliveira, J. Fu, L.V. Lelovsky, A.C. Dias, F. Qu. Phys. Rev. B **93**, 205422 (2016).

- [4] F. Qu, A.C. Dias, J. Fu, L. Villegas-Lelovsky, D.L. Azevedo. Sci. Rep. **7**, 41044 (2017). DOI: 10.1038/srep 41044
- [5] H. Rostami, R. Asgari, F. Guinea. J. Phys. Condens. Matter **28**, 495001 (2016).
- [6] C.G. Peterfalvi, A. Kormanyos, G. Burkard. Phys. Rev. B **92**, 245443 (2015).
- [7] L. Brey, H.A. Fertig. Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [8] A.R. Akhmerov, C.W.J. Beenakker. Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008).
- [9] A.R. Akhmerov, C.W.J. Beenakker. Phys. Rev. Lett. **98**, 157003 (2007).
- [10] V.A. Volkov, I.V. Zagorodnev. Low Temp. Phys. **35**, 2–5 (2009).
- [11] Р.З. Витлина, Л.И. Магарилл, А.В. Чаплик. Письма ЖЭТФ, **121**, 5, 381 (2025). [R.Z. Vitlina, L.I. Magarill, A.V. Chaplik. JETP Letters, **121**, 5, 360 (2025)].

Редактор А.Н. Смирнов