СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4 - 8554

В.Д.Караиванов

О СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНА В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ ИЗ ДЕЛЬТА - ОБРАЗНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

1975

P4 - 8554

В.Д.Караиванов*

О СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНА В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ОДНОМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ ИЗ ДЕЛЬТА - ОБРАЗНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

* Софийский университет, физический факультет, Болгария

Караиванов В.Д. Р4 - 8554

О спектре электрона в неупорядоченной одномерной решетке из дельта-образных потенциалов

Рассматривается задача об энергетическом спектре электрона в одномерной решетке из различных дельта-образных потенциалов. Решетка находится в бесконечно глубокой потенциальной яме. В случае, когда потенциалы узлов однотипны (ямы или барьеры) и имеют ограниченные интенсивности, показано, что в плотности состояний возникают особенности.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1975

Karaivanov V.D. P4 - 8554

On the Energy Spectrum of Electron in a Disordered Chain of Delta Function Potentials

The problem of energy spectrum of electron in a lattice of various delta function potentials is considered. The latticie is enclosed between infinitely high walls. In the case when the potentials are of the same type(wells or barriers) with limit intensities the singularities in the density of states were found.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1975

Трудность построения физической картины движения электрона в поле, которое не имеет трансляционной инвариантности, создает интерес к одномерным задачам подобного типа. Обычно потенциальное поле рассматривается как случайная величина, а конечные результаты, например для плотности состояний, находятся после усреднения. В данной работе принят другой подход: элементы случайности /распределения/ не вводятся явным образом, цель состоит в нахождении /при разумных ограничениях/ возможных общих свойств энергетического спектра электронов.

Исследуемая модель состоит из N узлов, образующих решетку с константой а. Каждый узел имеет дельта-образный потенциал. В случае бесконечной решетки, когда интенсивности потенциалов являются независимыми случайными величинами с одним и тем же распределением Коши, задача о нахождении функции Грина и плотности состояний рассмотрена в /1-3/. В /4/ исследуется случай, когда решетка находится в бесконечно глубокой потенциальной яме и явным образом вводятся граничные условия для волновой функции. Получены рекуррентные формулы для ее нахождения. В данной работе используются те же самые граничные условия, однако для решения уравнения Шредингера применяются замкнутые формулы.

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}+\sum_{n=1}^{N}\lambda_n\delta(x-na)\Psi(x)=E\Psi(x). \qquad /1/$$

Здесь m обозначает массу частицы, а λ_n дает интенсивность дельта-потенциала с пиком в n-ом узле. Используя то, что $\Psi(x)\delta(x-na)=\Psi(na)\delta(x-na)$, общее решение /1/ можно записать в виде:

а/ $E=0$,

$$\Psi(x) = c_1 + c_2 x + \sum_{n=1}^{N} \Psi_n \mu_n (x-na)\theta(x-na), \qquad /2/$$

б/ $E \neq 0$,

$$\Psi(x) = A\sin kx + B\cos kx + \frac{1}{k}\sum_{n=1}^{N} \Psi_n \mu_n \sin([k(x-na)])\theta(x-na), \qquad /3/$$

где

$$\Psi_n = \Psi(na), \quad \mu_n = \frac{2m\lambda_n}{h^2}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{h^2}}, \qquad /4/$$

причем, когда $E > 0$, то $\mathrm{Re}\,k > 0$, $\mathrm{Im}\,k = 0$, а когда $E < 0$, то $\mathrm{Re}\,k = 0$, $\mathrm{Im}\,k > 0$.

c_1, c_2, A, B - произвольные константы, которые определяются из граничных условий.

Будем считать, что решетка находится в бесконечно глубокой потенциальной яме. Для удобства начало ямы выбираем в точке $x=0$, а конец - соответственно в точке $x=Na$, так что длина ямы равна Na и внутри находятся N ячеек и $N-1$ узлов. /Последний узел совпадает с началом бесконечного барьера, и его дельта-потенциал не играет никакой роли/. Граничные условия в указанном случае имеют вид:

$$\Psi(0) = \Psi(Na) = 0. \qquad /5/$$

Для случая $E=0$ из /2/, /4/ и /5/ получаем:

$$c_1 = 0, \qquad \sum_{n=1}^{N} \mu_n \Psi_n (N-n) + c_2 N = 0, \qquad /6/$$

$$\Psi_n - a\sum_{n'=1}^{N-1} \mu_{n'} \Psi_{n'} (n'-n)\theta(n'-n) - c_2 na = 0. \qquad /7/$$

Так получаем однородную алгебраическую систему для неизвестных $\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_{N-1}, c_2$. Обращение в нуль определителя этой системы дает условие для существования $E=0$ как энергии стационарного состояния электрона. Ясно, что при произвольных μ_n /т.е. λ_n/ это условие не выполняется, т.е. в общем случае $E=0$ не является энергетическим уровнем.

Записывая определитель системы /6/, /7/, мы легко преобразуем его в виде

$$\begin{vmatrix} -\mu_1 a - 2 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 1 & -\mu_2 a - 2 & 1 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & -\mu_3 a - 2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & -\mu_{N-1} a - 2 \end{vmatrix} \qquad /8/$$

Когда

$$\mu_1 = \mu_2 = \ldots = \mu_{N-1} = \mu, \qquad /9/$$

т.е. дельта-образные ямы или барьеры одинаковы, тогда удобно ввести новую переменную ϕ :

$$-\mu a-2=2\cos\phi \ . \qquad /10/$$

Соответственно для /8/ получаем $\dfrac{\sin N\phi}{\sin\phi}$, когда $\phi\neq k\pi$, и $N(-1)^{(N-1)k}$, когда $\phi=k\pi$. После элементарных вычислений этот результат приводит к выражению

$$\mu=-\frac{4}{a}\sin^2\frac{\pi\ell}{2N} \ . \qquad /11/$$

$\ell=1,2,3,\ldots$

Отметим, что /11/ не совпадает с соответствующим условием для μ в случае, когда имеем циклические граничные условия для модели Кронига и Пенни; тогда $2N$ заменено на N.

Рассмотрим теперь случай, когда $E>0$. Соответственно из /3/ и /5/ получаем $B=0$, а остальные константы, Ψ_1, Ψ_2, ... , Ψ_{N-1}, A, снова определяются из однородной линейной алгебраической системы. Обращение в нуль определителя этой системы дает дисперсионное уравнение, содержащее k. Оно имеет вид

$$\begin{vmatrix}
1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \sin u \\
-\frac{t_1}{u}\sin u & 1 & 0 & \ldots & 0 & \sin 2u \\
-\frac{t_1}{u}\sin 2u & -\frac{t_2}{u}\sin u & 1 & \ldots & 0 & \sin 3u \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
-\frac{t_1}{u}\sin(N-2)u & -\frac{t_2}{u}\sin(N-3)u & -\frac{t_3}{u}\sin(N-4)u & \ldots & 1 & \sin(N-1)u \\
-\frac{t_1}{u}\sin(N-1)u & -\frac{t_2}{u}\sin(N-2)u & -\frac{t_3}{u}\sin(N-3)u & \ldots & -\frac{t_{N-1}}{u}\sin u & \sin Nu
\end{vmatrix}=0, \qquad /12/$$

где введены безразмерные переменные

$u=ka$; $t_n=\mu_n a$, $n=1,2,\ldots,N-1$.

Сразу видно, что

$u_\ell=\ell\pi$, $\ell=1,2,3,\ldots$

являются решениями /12/ и им соответствуют энергии стационарных состояний

$$E_\ell=\frac{\pi^2 h^2\ell^2}{2ma^2}, \quad \ell=1,2,3,\ldots$$

Будем рассматривать малые области вокруг точки u_ℓ. Тогда определитель в /12/ преобразуется следующим способом: если ℓ - четное число, вычитаем из каждого ряда предыдущий и повторяем эту операцию. В случае, когда ℓ - нечетное число, производим сложение. Оба случая дают одно и то же, поэтому дальше ограничимся четными ℓ. Полагаем

$$u=2p\pi+v, \qquad /13/$$

где $p=1,2,3,\ldots$,

$$|v|\ll 1. \qquad /14/$$

На основании /13/ и /14/ всюду, где появляется $\sin\frac{2u}{2}$, пишем $\frac{v^2}{4}$, и соответственно /12/ принимает вид

$$\Delta(v)+v^2\sum_{n=1}^{N}\Delta_n(v)=0, \qquad /15/$$

где определитель $\Delta(v)$ содержит в своих элементах только нулевые и первые степени v, $\Delta_n(v)$ - определитель, где n-ый столбец состоит из соответствующих выражений перед v^2, а другие столбцы - те же самые, что и у $\Delta(v)$. Выражения, содержащие v^4, v^6 и т.д., отбрасываются.

Уравнение /15/ позволяет уточнить неравенство /14/ таким образом, чтобы в /15/ было бы обоснованным выбрасывание слагаемого, содержащего v^2. Считается, что вообще N достаточно большое, $N \gg 1$, и, кроме этого, $|t_n|$ ограничены. Тогда получаем, что если

$$|v| \lesssim \frac{1}{N}, \qquad /16/$$

то /12/ переходит в уравнение

$$\begin{vmatrix} \eta_1 v - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & \eta_2 v - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \eta_3 v - 2 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \eta_{N-2} v - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \eta_N v - 2 \end{vmatrix} = 0, \qquad /17/$$

где для краткости положено

$$\eta_n = -\frac{t_n}{2p\pi}, \qquad /18/$$

$$n = 1, 2, \dots, N-1.$$

Отметим, что подобные тридиагональные матрицы часто встречаются в теории неупорядоченных систем. В модели Андерсона [5] рассматривается матрица типа написанной в /17/, однако случайными величинами являются свободные члены в элементах главной диагонали. В теории колебаний одномерного неупорядоченного кристалла появляется симметрическая матрица, где разбросу подвергнуты тоже свободные члены элементов главной диагонали, а также и элементы слева и справа [6].

Уравнение /17/ можно записать в виде $P_{N-1}(v) = 0$, где $P_{N-1}(v)$ - полином v степени $N-1$. Разлагая определитель в /17/ по элементам последнего столбца, получаем

$$P_{N-1}(v) = (\eta_{N-1} v - 2) P_{N-2}(v) - P_{N-3}(v), \qquad /19/$$

где $P_n(v)$ дается определителем, содержащим первые n рядов и столбцов из левой стороны /17/.

Для полиномов, удовлетворяющих рекуррентному соотношению типа /19/, в силе следующие результаты [7]: если η_1, η_2, $\eta_3 \dots$ - положительные, то P_{n-1} и P_n имеют реальные и простые корни и в интервале, определенном двумя корнями P_n, содержится один и только один корень P_{n-1}.

Из /4/ и /18/ следует, что условие

$$\eta_n > 0 \qquad /20/$$

ведет к рассмотрению решетки из дельта-образных потенциальных ям. Однако, так как в /17/ $\eta_n v$ входят только в таком произведении, то все результаты переносятся на случай решетки из дельта-образных барьеров, только v переходит в $-v$.

Из /17/, применяя формулу Тейлора, легко получить коэффициенты P_{N-1}. Полагая

$$P_{N-1}(v) = a_{N-1} v^{N-1} + a_{N-2} v^{N-2} +$$

$$+ \dots + a_1 v + a_0,$$

имеем

$$a_0 = (-1)^{N-1} N, \qquad /21/$$

$$a_1 = (-1)^{N-2} \sum_{n=1}^{N-1} n(N-n), \qquad /22/$$

. . . .

$$a_k = (-1)^{N-1-k} \sum_{n_k > n_{k-1} > \ldots > n_1 = 1}^{N-1} \eta_{n_1} \eta_{n_2} \ldots \eta_{n_k} \times$$

$$\times n_1 (n_2 - n_1) \ldots (n_k - n_{k-1})(N - n_k), \qquad /23/$$

. . . .

$$a_{N-2} = -2\eta_1 \eta_2 \ldots \eta_{N-1} \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{\eta_n}, \qquad /24/$$

$$a_{N-1} = \eta_1 \eta_2 \ldots \eta_{N-1} . \qquad /25/$$

Из этих выражений и /20/ следует, что все корни уравнения /17/ v_i - положительные.

Далее нас будут интересовать корни v_i, которые удовлетворяют /16/. Для определения плотности состояний нужно только число A_N этих корней. Чтобы получить какую-нибудь информацию относительно A_N, сузим условие /21/ и рассмотрим случай, когда

$$0 < \eta' \leq \eta_n \leq \eta'', \qquad /26/$$

$$n = 1, 2, 3, \ldots,$$

т.е. все η_n, соответственно глубины ям λ_n, ограничены.

Из /21/, /22/, /24/, /25/ и /26/ получаем, что

$$\left\{ \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{v_i} \right\} = N^2, \qquad /27/$$

$$\left\{ \sum_{i=1}^{N-1} v_i \right\} = N, \qquad /28/$$

где $\{L\}$ обозначает порядок величины L по отношению к N.

/27/ и /28/ одновременно удовлетворяются, когда

1. $A_N \leq \bar{A}$, где $\bar{A}$ - константа, не зависящая от N.

2. A_N неограниченно нарастает, когда N нарастает /не обязательно пропорционально N /.

$A_N < N$, иначе не выполняется /28/.

Легко показать, что первое предположение неудовлетворительно. Отметим, что из сказанного относительно расположения корней P_n и P_{n-1} следует, что A_N или возрастает, или остается постоянным. Пусть $A_N = \bar{A}$. Без ограничений можно считать, что $N \gg 2\bar{A}$. Из свойств корней алгебраического уравнения и /23/ следует, что при $k \ll N$

$$\left\{ \sum_{i_k > i_{k-1} > \ldots i_1 = 1}^{N-1} \frac{1}{v_{i_1} v_{i_2} \ldots v_{i_k}} \right\} \geq N^{k+1}. \qquad /29/$$

Из /27/ следует, что $\left\{ \frac{1}{v_i} \right\} \leq N^2$. Так как число членов в сумме /29/ порядка N^k /при $k \ll N$ /, то когда $k > 2\bar{A}$,

$$\left\{ \sum_{i_k > i_{k-1} > \ldots > i_1 = 1}^{N-1} \frac{1}{v_{i_1} v_{i_2} \ldots v_{i_k}} \right\} \leq N^k. \qquad /30/$$

Но /29/ и /30/ противоречат друг другу. Следовательно, предположение $A_N = \bar{A} = \mathrm{const}$ неверно.

Для вычисления плотности состояний $\rho(E)$ /относительно одной ячейки/ надо учесть, что A_N энергетических уровней лежат в энергетическом интервале (E, E_{2p}). /Переход от N к переменной E, как всегда, дает квазинепрерывное распределение/. То, что A_N неограниченно возрастает, когда $N \to \infty$, означает, что в точке E_{2p} $\rho(E)$ имеет особенность. Соответственно при $E \to E_{2p}$ можно написать следующие асимптотические равенства:

$$\rho(E) = 0, \qquad /31/$$

когда $E < E_{2p}$, и

$$\rho(E) = f\left(\frac{1}{E - E_{2p}}\right), \qquad /32/$$

когда

$$E > E_{2p}.$$

Здесь $f(x)$ - положительная, непрерывно возрастающая функция x $|x > 0|$ и $f(x) < x$.$f(x)$ с точностью до множителя есть A_N .

Для точки E_{2p+1} надо просто поменять правые части /31/ и /32/. Для барьеров все наоборот,т.е. результат относительно ям для E_{2p}, соответственно E_{2p+1}, переходит в результат относительно барьеров для E_{2p+1}, соответственно E_{2p}. Отметим, что это относится только к общему виду $\rho(E)$. Вообще функция f в /32/ может быть разной для различных E_ℓ, $\ell = 1,2,3,\ldots$.

Рассмотрим случай /9/. Тогда при помощи введения новой переменной соотношением, аналогичным /10/, /17/ можно решить. Учитывая /16/, получаем вблизи u_{2p}

$$v_j = -\frac{2\pi^2 p}{t}\left(\frac{j}{N}\right)^2, \quad j = 1,2,3,\ldots; \quad j \lesssim N.$$

Вводя безразмерную переменную $\alpha = \frac{j}{N}$, плотность

состояний можно вычислить сразу. Для f в /32/ получаем

$$f\left(\frac{1}{E - E_{2p}}\right) = \frac{1}{4p\sqrt{E'}\sqrt{E - E_{2p}}}, \qquad /33/$$

где $E' = \dfrac{\pi^3 h^2}{m a^2 |t|}$.

Легко модифицировать этот результат для E_{2p+1} и

для барьеров . Существенной является особенность $|E - E_b|^{-\frac{1}{2}}$, характерная для одномерных задач.

В случае разупорядоченной решетки можно только предположить /на основании одномерности задачи/, что

особенность в /32/ тоже типа /33/. Нам кажется, что появление особенности /32/ связано с однозначностью величин λ_n /решетка только из ям или решетка только из барьеров/. В случае разнозначных λ_n эта особенность, должно быть, размывается.

Литература

1. *P.Lloyd. J.Phys. C., 2, 1717 (1969).*
2. *Ю.А.Бычков. Письма в ЖЭТФ, 17, 266 /1973/.*
3. *I.Z.Kostadinov. Preprint ICTP-Trieste, No. IC/74/31 (1974).*
4. *Kazushife Ishii. Supplement of the Progress of Theoretical Physics, No. 53, 77 (1973).*
5. *P.W.Anderson. Phys.Rev., 109, 1492 (1958).*
6. *А.Марадудин. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. "Мир", Москва, 1968.*
7. *Н.Обрешков. Висша алгебра. ДИ "Наука и изкуство", София, 1954.*

Рукопись поступила в издательский отдел
24 января 1975 года.