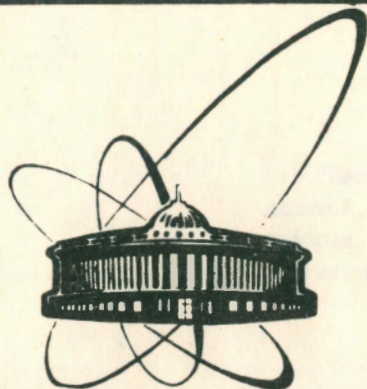


90-46



объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

♀

3 383

P4-90-46

Б. Н. Захарьев

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА НА РЕШЕТКАХ  
И В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ (ДЛЯ ПЕШЕХОДОВ)

Направлено в журнал "Physica Scripta"

1990

"Писать мне приятно лишь в том случае, если мне кажется, что я открываю нечто новое, чего никто не говорил. Это, конечно, иллюзия, но, пока она длится, мне весело." Корней Чуковский, 1961г.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из задач теории - объединять, упрощать наши представления об окружающем нас мире, делать их доступнее широкому кругу лиц (экономика мышления). В условиях "перманентной революции" в квантовой физике это особенно актуально. Можно предположить, что ограниченный контингент физиков, не являющихся, подобно данному автору, специалистами в области квантовой теории кристаллов, испытывали неудовлетворенность от того, что не представляли себе "на пальцах", например, смысл квазимпульса или то, как появляются связанные состояния над полосой непрерывного спектра. Ниже будет изложено, как лучше понимать специфику движения на решетках и в периодическом поле, проводя параллели с обычными свободными решениями одномерного уравнения Шредингера:

$$-\Psi''(x) = E\Psi(x). \quad (1)$$

Первым толчком к новому пониманию явилась идея [1] "разделения переменных" для одномерной задачи с периодическим полем. Оказалось, что можно отделить движение по непрерывной переменной  $X$  в пределах одного периода  $\Delta$  ( $0 \leq X \leq \Delta$ ) от движения по дискретной переменной  $n$ , нумерующей периоды ( $x = n\Delta + X$ ). При этом волновая функция представляется в виде произведения функций  $\exp(i\hat{k}n\Delta) \psi(X)$  этих раздельных движений, а энергия - в виде суммы соответствующих парциальных энергий. Другим толчком послужила беседа с Н.Е. Фирсовой о предложенном ей формализме обратной задачи на всей оси для квадратично интегрируемых возмущений периодического поля [2]. Стало ясно, что многие подходы обратной задачи (Гельфанда-Левитана и Марченко на полуоси, R-матричный на конечном отрезке и др.) могут быть распространены на случай с исходным  $V_0$  периодическим полем и соответственно обобщены различные точно решаемые модели. Например, связанные состояния ниже и выше непрерывного спектра и погруженные в него. Можно также рассматривать линейно независимые бlochовские решения при фиксированной энергии как аналоги обычных свободных решений ( $\exp \{i\hat{k}x\}$ ,  $\sin kx$ ,  $\cos kx$ ,  $\exp \{i\hat{\alpha}x\}$ ,  $\text{sh } kx$ ,  $\text{ch } kx$ ) и строить из них

на произвольных отрезках с периодическим полем общие решения в виде линейных комбинаций, постоянные коэффициенты которых для конкретных решений определяются из условий сшивания. В частности, можно "вшить" в периодическое поле участок другого периодического поля с лакуной (запрещенной зоной), "перегораживающей" полосу проводимости, создавая таким образом аналог потенциального барьера. В данной работе мы рассмотрим эффект туннелирования для блоховских волн, в частности резонансного, когда система барьеров, каждый из которых трудно проникаем, оказывается прозрачной. Обсуждается также движение пакетов в разрешенных и запрещенных зонах (аналог эффекта Флетчера [3,4]) и туннелирование связанных частиц (аналог работ [5,6,7]).

К рассматриваемой здесь теме имеют отношение работы [8-12].

## 2. ОБЩИЕ ЧЕРТЫ И ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИИ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В СЛУЧАЕ НЕПРЕРЫВНОЙ КООРДИНАТЫ, НА РЕШЕТКЕ И В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Подчеркнем параллели между указанными типами решений и договоримся о нестандартных терминах. Напомним аналогичную ситуацию, когда мы сопоставляем функцию Бесселя  $j$  - синусу, функцию Неймана  $n$  - косинусу, функции Ханкеля  $H_n^{(1,2)}$  - экспонентам с действительными и мнимыми аргументами; так же можно говорить и о кулоновских, квазипотенциальных, блоховских "синусах", "косинусах" и "экспонентах".

Наряду с уравнением (1) будем рассматривать конечно-разностное уравнение Шредингера на решетке (с шагом  $\Delta$ ):

$$T^{\text{fd}} \Psi_n \equiv -\hbar^2 \frac{\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1}}{2m \Delta^2} = E \Psi_n, \quad (2)$$

где  $T^{\text{fd}}$  - решеточный оператор кинетической энергии - вторая разностная производная, и уравнение с периодическим потенциалом  $V(x) = V(x + \Delta)$  с периодом  $\Delta$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (3)$$

с условием периодичности, обеспечивающим равенство по модулю значений функции в точках, разделенных целым числом периодов  $\Delta$ :

$$\Psi(x + n\Delta) = \exp(i k n \Delta) \Psi(x); \quad \Psi(x + n\Delta) = \Psi(x). \quad (3')$$

Разностное уравнение (2) имеет решение в виде свободной волны с импульсом  $\hat{k}\Delta$

$$\exp(ikn\Delta),$$

только с дискретной координатой  $n$ . Действительно, подставляя его в (2) и сокращая обе стороны равенства на эту экспоненту, получаем тождество, если  $k$  и  $E$  связаны соотношением

$$1 - \cos \hat{k} = mE \Delta^2 / \hbar^2 \quad (4)$$

в отличие от обычной связи  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ . Эта специфика решеточной волны связана с тем, что дискретная переменная  $n$  не допускает решений с частотами выше  $1/\Delta$ . В частности, гармоника синусоидального решения  $\sin kx$  уравнения (1) неограниченно сжимается с ростом энергии и частоты  $k = (2mE)^{1/2}$ , а дискретные точки "гармошки"  $\sin \hat{k}n\Delta$ , очевидно, невозможно сблизить больше чем на  $\Delta$ .

При решении уравнения (3) для периодического поля можно рассматривать непрерывную переменную  $x$ , имеющую значения на всей оси  $(-\infty, \infty)$ , как комбинацию двух переменных  $n$  и  $X$ :

$$x = n \Delta + X, \quad (5)$$

где  $X$  определена на интервале  $[0, \Delta]$ , а  $n$  пробегает все целые числа. Тогда периодические условия (3') можно рассматривать как разделение переменных  $n$  и  $X$  в уравнении в смешанных частных производных (разностных по  $n$  и обычных по  $X$ ;  $\hbar = 1$ ;  $m = 1$ ):

$$(T^{fd} - d^2/dX^2 + V(X)) \Psi(n, X) = (E + \epsilon^{fd}) \Psi(n, X), \quad (6)$$

где  $E$  и  $\epsilon^{fd}$  — энергии движения по непрерывной координате  $X$  на одном периоде и по дискретной координате  $n$ .

### 3. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ НАД НЕПРЕРЫВНЫМ СПЕКТРОМ

Понятие зоны проводимости или запрещенной зоны относятся к бесконечной оси, но и для отдельных ее отрезков можно говорить о соответствующих энергетических зонах с колеблющимися или растущими (спадающими) решениями.

Например, вставим в одномерную решетку с шагом  $\Delta$  и зоной проводимости (непрерывного спектра, колеблющихся решений — комбинаций синусов и косинусов)  $E < 4/\Delta^2$  кусок решетки с меньшим шагом  $b < \Delta$  и более широкой зоной колеблющихся решений  $E < 4/b^2$  (см. рис 1), выпирающей в запрещенную область для соседних полуосей. Тогда колеблющиеся решения в верхней части этой зоны должны сшиваться с экспоненциально убывающими решениями соседних полуосей, что возможно лишь при дискретных значениях энергии, которые как раз и отвечают

связанным состояниям над непрерывным спектром (непрерывный спектр, естественно, располагается в разрешенной зоне полюсесей). То же было бы, если с помощью потенциального барьера конечной ширины мы приподняли бы зону колеблющихся решений на отрезке решетки с постоянным шагом  $\Delta$  (могли бы получить связанные состояния над барьером).

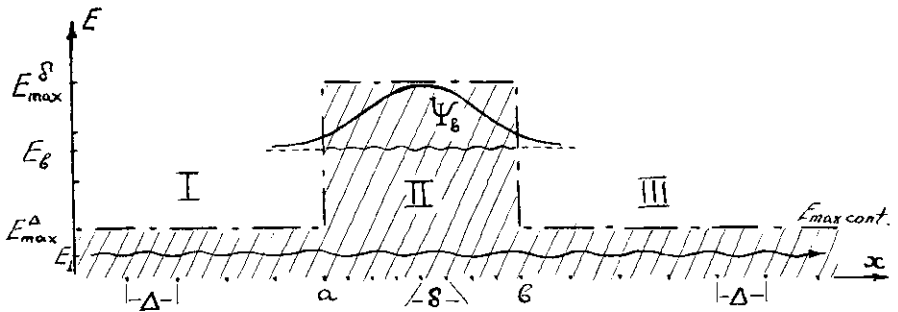


Рис. 1. "Вшивание" в решетку с шагом  $\Delta$  ( полюсы I, III ) конечного интервала ( участок II :  $a < x < b$ ) с меньшим шагом  $b$ , но более широкой зоной колеблющихся решений. Штрихпунктирная линия окаймляет сверху область (заштрихованную) колеблющихся решений в плоскости  $(E, x)$ . Энергия  $E_B$  лежит в области непрерывного спектра ( $E < E_{\max \text{ cont}} = E_{\max}^{\Delta}$ ). Осциллирующие решения в прямоугольнике, выпирающем над полосой непрерывного спектра  $0 < E < E_{\max}$  лишь при дискретных значениях энергии могут быть сшиты со спадающими в обе стороны от II. Так получают связанные состояния над полосой рассеяния  $\Psi_B (E = E_B)$ .

Подобная же картина получается если приподнять на конечном участке полосу осциллирующих решений с помощью отталкивающего потенциала  $V = V_0$ ; см. рис 2.

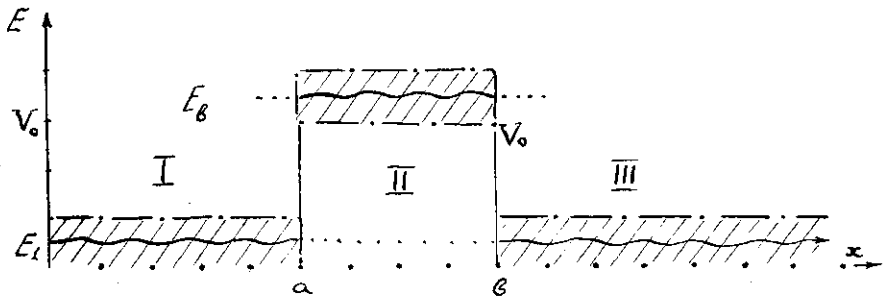


Рис. 2. Образование связанного состояния над полосой непрерывного спектра благодаря подъему участка колеблющихся решений на интервале II в область экспоненциально затухающих ( растущих ) решений на полюсах I и III. В отличие от рис. 1, сдвиг верхней границы зоны осциллирующих решений в области II получен за счет включения отталкивающего потенциала (барьера)  $V(x) = V_0$  при  $x \in II$ .

Аналогично можно конструировать различные системы и из кусков с периодическими потенциалами, чередуя по желанию участки разрешенных зон с лагунами (областями растущих и убывающих решений, см. раздел 5 о туннелировании).

#### 4. ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В РАЗЛИЧНЫХ ФОРМУЛИРОВКАХ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Аналог решеточной (периодической) обратной задачи в подходе Гельфанда-Левитана (на полуоси) строится с помощью регулярных в нуле решений  $\phi$  (типа синусов). Как это показано в [7], можно построить различные точно решаемые модели с потенциалами баргмановского типа: например, посадить связанное состояние в непрерывный спектр или в запрещенную область (в любую полосу проводимости или лагуну). Формулы для волновых функций таких состояний имеют вид:

$$\phi(\hat{k}, r) = \frac{\sin \hat{k}r \Phi(\hat{k}, r)}{1 + \int_0^r \sin^2 \hat{k}r' \Phi(\hat{k}, r') dr'} \quad (7)$$

для полосы проводимости и аналогично для запрещенных зон, только с блоховским "гиперболическим синусом Bsh" вместо блоховского синуса. Теорема о двух спектрах? Формула (7) получается для простейшего одночленного вырожденного ядра  $Q(r, r')$  уравнения типа Гельфанда-Левитана. Аналогично обобщаются и многочленные формулы баргмановского типа (см. [7]).

#### 5. ТУННЕЛИРОВАНИЕ

В зону проводимости решетки или периодического поля можно "вшить" перекрывающий ее потенциальный барьер так, чтобы блоховские волны могли туннелировать сквозь него (см. рис. 2). Потенциальная яма на конечном участке опускает зону осциллирующих решений, так что верхний ее край оказывается ниже верхней границы полосы проводимости - см. рис. 3. Тем самым в полосу проводимости сверху вдвигается участок запрещенной зоны, допускающей лишь туннельную проницаемость. Получается как бы "перевернутый (подвешенный) потенциальный барьер".

Точно так же в любую разрешенную зону периодического потенциала можно "вшить" лагуну (кусочек запрещенной зоны), так что она будет служить как эффективный потенциальный барьер для "свободных" блоховских волн в зоне проводимости - см. рис. 4. Система двух или более таких барьеров должна обладать свойством резонансного туннелирования: быть прозрачной для волн с резонансными энергиями  $E_{res}$  (квазистационарных состояний для стоячих волн между барьерами), см. рис. 5.

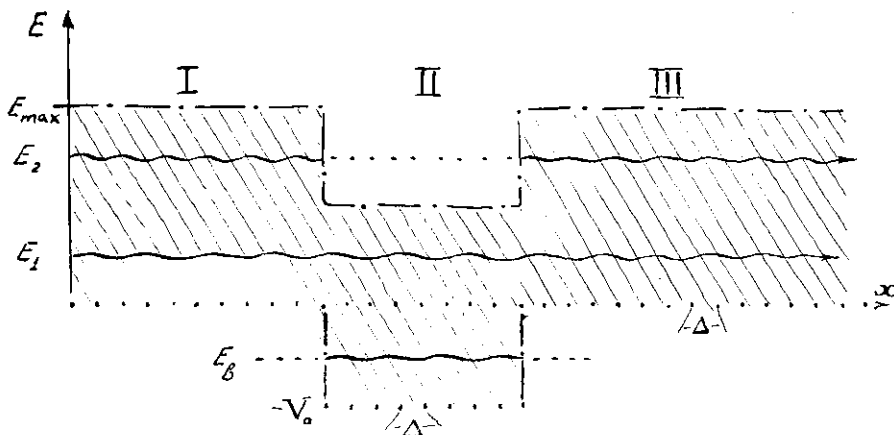


Рис. 3. Эффективный "потенциальный" барьер, спускающийся сверху в зону проводимости в области притяжения  $V(a < x < b) = -V_0 < 0$ . Штрихпунктиром ограничена зона осциллирующих решений (заштрихована).  $E_{max}$  - верхняя граница зоны проводимости. При энергии  $E_1$  волны распространяются без туннелирования, а при  $E_2$  туннелируют через свисающий из верхней запрещенной зоны барьер.

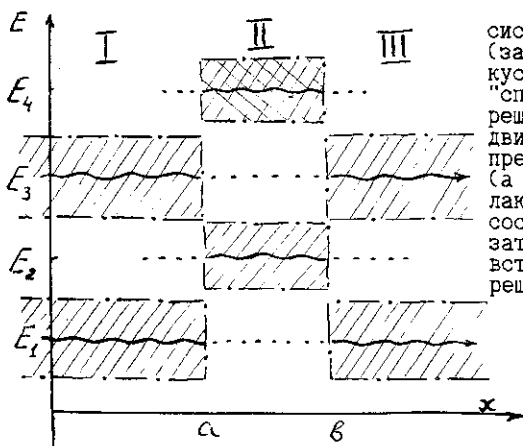


Рис. 4. В периодическое поле с системой полос проводимости (заштрихованными однократно) вшит кусок с другим полосатым "спектром" (зонами осциллирующих решений), так что при  $E_1$  и  $E_3$  движение в зонах проводимости прерывается зонами туннелирования ( $a < x < b$ ), а при  $E_2$  и  $E_4$  в лакунах возможны связанные состояния, экспоненциально затухающие в обе стороны от вставленных зон осциллирующих решений (с двойной штриховкой).

Тем самым мы можем как бы управлять свойствами зоны (учитывая к тому же упомянутую выше возможность сажать в любое место связанные состояния, с помощью возмущений периодического поля потенциалами баргмановского типа).

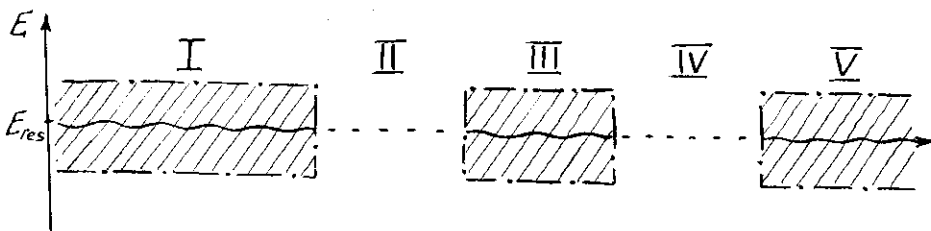


Рис. 5. В зону проводимости (участки I, III, V) вшиты два отрезка запрещенной зоны (II и IV), которые действуют как эффективные потенциальные барьеры. При энергии  $E_{res}$  на участке III между барьерами образуется квазистационарное состояние и система барьеров оказывается прозрачной.

## 6. ДВИЖЕНИЕ ПАКЕТОВ

Из осциллирующих решений в зонах проводимости можно строить пакеты. Для этих пакетов естественно ожидать эффект Флетчера (рост скорости туннелирования с шириной барьера) и своеобразную временную эволюцию пакетов в подбарьерной области, которые рассматривались без периодического поля в [4].

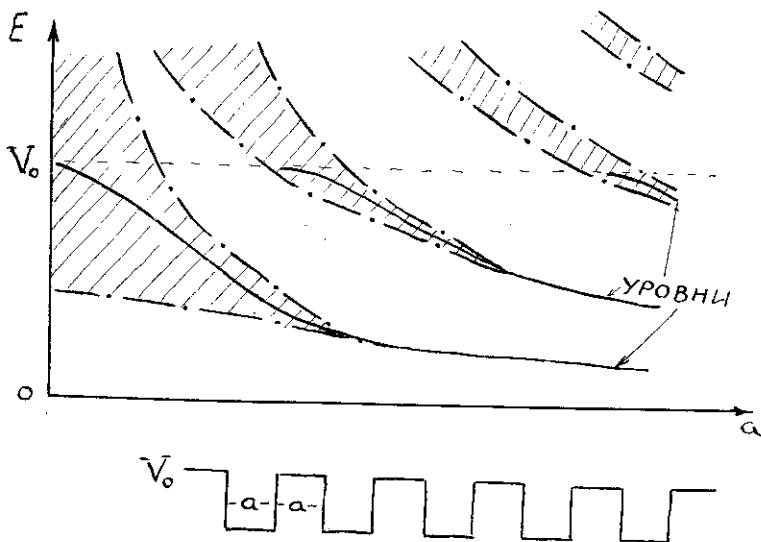


Рис. 6. Спектр в периодическом потенциале, составленном из потенциальных барьеров высоты  $V_0$ , и ширины "a", расположенных на том же расстоянии "a" друг от друга, в зависимости от величины "a".



Скорость пакета в зоне проводимости выражается обычной формулой (см., например, формулу 55.20 в книге Блохинцева [13]):

$$v = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{\partial E(k)}{\partial k} \right]_0, \quad (8)$$

где индекс "0" означает, что производная (в нашем случае по квазиимпульсу  $\hat{k}$ , а не по импульсу  $k$ ) берется при среднем для пакета значении энергии. Если периодическое поле составлено из одинаковых потенциальных ям, отделенных друг от друга барьерами, то полоса проводимости, являющаяся предельным случаем полосы расщепленных уровней экспоненциально (как и подбарьерная проницаемость) сжимается с ростом барьеров. Вместе с сужением полосы проводимости экспоненциально спадает и скорость движения пакета (несмотря на "резонансную прозрачность" системы барьеров при разрешенных значениях энергии). Это объясняется тем, что как и в случае резонансного туннелирования через два барьера, требуется, чтобы в квазистационарном состоянии успела накопиться стоячая волна с большой амплитудой (во столько раз большей амплитуды падающей волны, во сколько ослабляется одним из барьеров прошедшая волна; см. [7]). Кстати, на рис. 5 (ссылка на автора рисунка, к сожалению, утеряна) представлена зависимость ширины полос проводимости при расширении барьеров (и ям) периодического поля. Видно, как сужаются зоны с расширением барьеров.

## 7. МНОГОКАНАЛЬНЫЕ, МНОГОМЕРНЫЕ И МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СИСТЕМЫ

Связанные одномерные уравнения Шредингера с периодической матрицей взаимодействия  $V_{\alpha\beta}(x + \Delta) = V_{\alpha\beta}(x)$  представляют собой матричное обобщение одноканальной задачи с  $V(x + \Delta) = V(x)$ .

Спектр матричной периодической задачи тоже полосатый. Если в какой-либо точке имеется волна лишь в одном из каналов, то можно ожидать в соседних точках появления волн и в других каналах за счет связи каналов. Однако, имеется  $N$  (по числу каналов) собственно-канальных состояний, для которых относительные веса канальных функций остаются инвариантными при сдвиге координаты  $x$  на период  $\Delta$  (появляется лишь общий фазовый множитель  $\exp[i\hat{k}\Delta]$ ).

Представляет интерес рассмотрение модели двух частиц в периодическом поле, связанных бесконечной потенциальной ямой. Если разложить волновую функцию всей системы  $\Psi$  по состояниям внутреннего движения  $\Phi_\alpha$  квазидейтона, то для функций  $F_\alpha$ , описывающих движение его центра масс, получим систему многоканальных уравнений с периодической матрицей взаимодействия  $V_{\alpha\beta}(x)$ .

Для каждой из частиц при выключенном их взаимодействии имеется

полосатый спектр. Включение взаимодействия приводит к обмену энергией между частицами, происходят перескоки отдельных частиц из полосы в полосу (сохраняется лишь полная энергия системы). Полосатый же спектр многоканальной системы - это спектр пары, перестроенный с учетом взаимодействия из "несохраняющихся" полос проводимости отдельных частиц. В этом перестроенном спектре уже нет перескоков между полосами (не следует путать спектр независимой частицы и спектр пары).

## 8. РЕЛЯТИВИСТСКИЙ СЛУЧАЙ

Неясно, имеет ли смысл рассматривать движение волн с релятивистскими скоростями, учитывая периодическое поле, например, в квазипотенциальном подходе (см. [9]). Во всяком случае, можно ввести квазипотенциальные бловские синусы, косинусы, экспоненты, как это было сделано выше.

При каналировании частиц высоких энергий через кристаллы можно пренебречь полем кристалла в продольном (по движению частиц) направлении и учитывать лишь периодическое поле для поперечного низкоэнергетического движения. При этом, даже в полосе проводимости по поперечному движению, пучок может хорошо удерживаться в канале, благодаря медленному движению через периодические барьеры, о чем было сказано выше (в связи с формулой (8)).

При отражении волн от движущейся границы [12] меняются частоты отраженной и преломленной волн, угол падения оказывается не равным углу отражения. В случаях, когда скорость движения границы раздела превышает фазовую скорость волн в замедляющей среде, отраженная волна вообще пропадает, зато появляется вторая преломленная волна. В работе [12] рассматривались электромагнитные волны, интересно было бы выяснить, какие результаты получатся для волн, отвечающих массивным частицам, и что вносит в эффект внешнее периодическое поле.

Написать данную работу мне помогли беседы с И. В. Амирхановым, Л. Г. Заставенко, А. И. Могильнером, Н. Е. Фирсовой, выражаю им свою признательность.

### Литература

1. Захарьев Б. Н., Заставенко Л. Г. - Препринт ОИЯИ Р4-88-662, Дубна, 1988; Phys. Rev. A39, N 11, 5628 (1989)
2. Фирсова Н. Е. - Мат. Заметки т. 18, с. 831 (1975); Записки научн. сем. ЛО МИАН т. 51, с. 183-196 (1975)
3. Fletcher J. R. - J. Phys. C18, L55, 1985
4. Захарьев Б. Н., Ольховский В. С., Шилев В. - Препринт ОИЯИ, Р4-89-289, Дубна

- 1989; Труды международного совещания "Order, Disorder and Chaos in Quantum Systems" Dubna 1989. World Scientific, Singapore, 1990.
5. Амирханов И. В., Захарьев Б. Н. — ЖЭТФ 49, с. 1097-1102, 1965.
  6. Sokolov S. N., Zakhariev B. N. — Ann. d. Phys. 14, p. 229-232, 1964.
  7. Захарьев Б. Н., Сузько А. А. — Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи. Энергоатомиздат М., 1985; 2-е переработанное издание Springer 1990.  
Захарьев Б. Н., Костов Н. А., Плеханов Е. Б. — ЭЧАЯ т. 21, вып. 4, 1990.
  8. Игнатович В. К. — УФН, 150, вып. 1, с. 145-158, 1986; Препринт ОИЯИ P4-88-693, Дубна 1988; P4-87-878, 1987; P4-89-671, 1989.
  9. Todorov I. T., in: Institute For Theoretical Physics, University of Colorado, Summer, 1969.
  10. Mattis C. — Rev. Mod. Phys. 58, N 2, 361-380, 1986.
  11. Херман М. — Полупроводниковые сверхрешетки. М.: Мир, 1989.
  12. Болотовский Б. М., Столяров С. Н. — УФН т. 159, вып. 1, с. 155-180 1989.
  13. Блохинцев Д. И. — Основы квантовой механики М., Наука 1976.