Доклады Академии наук СССР
1966. Том 166, № 3

УДК 530.145

ФИЗИКА

Г. М. ЗАСЛАВСКИЙ, А. М. ФРИДМАН

ДВИЖЕНИЕ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЧАСТИЦЫ В КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 4 II 1965)

При рассмотрении движения частиц в кристаллических структурах большое значение имеет учет «дефектов» (отклонений потенциала от периодичности). Если дефекты малы, то анализ изменений, происходящих с энергетическим спектром и волновой функцией частицы, можно провести с помощью теории возмущений ([1]). Теория возмущений оказывается неприменимой, когда эти дефекты велики или «накапливаются» на больших расстояниях.

И. М. Лифшицем ([2]) было показано, что в первом приближении медленное изменение потенциала может быть учтено классическим образом. Были получены, в частности, волновые функции, определяемые через классический закон дисперсии для чисто периодического потенциала. С другой стороны, движение частицы в квазипериодическом потенциале с некоторым специальным ограничением на вид апериодичности было исследовано в работе Джеймса ([3]) с помощью метода, аналогичного методу ВКБ. Решения, полученные в ([2]), представляют собой главные члены асимптотических рядов для ВКБ-приближения волновых функций. Для ряда задач, связанных с более тонким изучением апериодических структур ([2]), существенно детальное выяснение поведения электрона вблизи краев зон, или, иными словами, учет неквазиклассических эффектов за счет накопления медленных изменений структуры потенциала. Подобная задача изучалась в ([4]). Однако метод, использованный в ([4]), довольно сложен в том смысле, что получение конкретных физических результатов связано с преодолением значительных технических трудностей. Ниже будет предложен достаточно простой метод учета неквазиклассических поправок.

1. Запишем уравнение Шредингера:

$$d^2\psi / dx^2 + [E - U_1(x) - U(x)]\psi = 0;$$
$$U(x + L(x)) = U(x); \quad \hbar = 2m = 1, \tag{1}$$

где $U_1(x)$, $L(x)$ имеют характерную длину изменения $L_1 \gg L$. Мы начнем рассмотрение со случая, когда U_1, $L = \mathrm{const}$. Решение в этом случае с чисто периодическим потенциалом хорошо известно. В частности ВКБ-приближение было рассмотрено в ([5]). Однако нам будет удобно кратко рассмотреть чисто периодический случай методом, которым мы воспользуемся в дальнейшем.

Квазиклассическое решение имеет вид

$$\psi_\pm(x) \simeq p^{-1/2} \exp\left\{\pm i \int^x p\,dx\right\}; \quad p^2 = E - U_1 - U(x) \tag{2}$$

На рис. 1 изображены линии уровня, на которых $\mathrm{Im}\int^x p\,dx = 0$.

Пусть волновая функция задана в области $x_3 > x > x_0$:

$$\psi(x) = A\psi_+ + B\psi_-. \tag{3}$$

Тогда в области $x_1 = x_3 - L > x > x_0 - L = x_2$

$$\psi(x) = \bar{A}\psi_+ + \bar{B}\psi_-, \tag{4}$$

где

$$\begin{pmatrix} \bar{A} \\ \bar{B} \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \beta e^{\delta - ia} & -e^{\delta - ia} \\ e^{\delta + ia} & \alpha e^{\delta + ia} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$\delta = \left| \int_{x_1}^{x_0} p\,dx \right|, \quad a = \int_{x_2}^{x_1} p\,dx, \tag{6}$$

а коэффициенты α, β можно определить, обходя точки x_0, x_1 по контуру, изображенному на рис. 1, аналогично тому, как это делается в [6]. Это дает:

$$\alpha = -\beta^* = ie^{i\varphi}\sqrt{1 + e^{-2\delta}}, \tag{7}$$

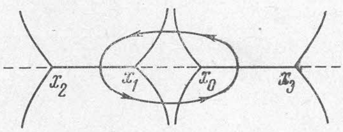

Рис. 1

где φ — неизвестная фаза *, а первый знак равенства следует из условия $\psi(x) = \psi^*(x^*)$. Записывая $\psi(x + L) = \mu\psi(x)$, получаем из (3) – (7)

$$\mu^2 - 2\sqrt{1 + e^{2\delta}} \cos (a + \varphi) \mu + 1 = 0. \tag{8}$$

Разрешенные зоны энергии получаются из условия $|\mu| = 1$ или

$$1 - (1 + e^{2\delta}) \cos^2 (a + \varphi) \geqslant 0. \tag{9}$$

В частности, случай $\delta \to 0$ соответствует сближению точек x_0 и x_1 на рис. 1, т. е.

$$E - U_1 \lessgtr U_0, \tag{10}$$

где U_0 — амплитуда потенциала $U(x)$. Разлагая $U(x)$ в ряд вблизи точек x_0, x_1, приходим к уравнению вида

$$d^2\psi \,/\, d\xi^2 + (\lambda + \xi^2)\psi = 0,$$

решением которого является функция параболического цилиндра. Используя для них известные асимптотические разложения [7], находим

$$\varphi = \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} + i\frac{\lambda}{2}\right) - i\frac{\lambda}{2}\ln 2 + \frac{i}{2}\lambda \ln|\lambda|. \tag{11}$$

Перепишем (1) в виде:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[q^2 - \frac{U}{U_0}(\Omega z)\right]\psi = 0;$$
$$q^2 = \frac{E - U_1}{U_0}; \quad z = x\sqrt{U_0}; \quad \Omega = \frac{2\pi}{L\sqrt{U_0}}. \tag{12}$$

Условие (10) означает $q \to 1$. Условием квазиклассичности является $\Omega \ll 1$. Отсюда нетрудно видеть, что

$$\lambda \sim \Omega^{-1}, \quad \varphi \sim \frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega}; \quad a \sim \frac{1}{\Omega}. \tag{13}$$

---

* Фаза φ связана с учетом следующего поправочного члена к (2) и позволит получить выражение для ширины разрешенных зон с подлогарифмической точностью.

Это сразу определяет, согласно (9), ширину разрешенных энергетических зон *

$$\Delta \sim \frac{\pi U_0 \Omega}{\ln c/\Omega}, \tag{14}$$

где c — число, зависящее от конкретного вида $U(x)$.

2. Учтем теперь зависимость U_1, Ω от x. Поскольку $L_1 \gg L$, то в первом приближении можно сохранить формулы (3) — (6), причем при вычислении a и δ зависимость U_1, L от x не учитывается. Во втором приближении учтем эту зависимость. Тогда вместо (5) имеем

$$\begin{pmatrix} \overline{A}(x) \\ \overline{B}(x) \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} \beta(x)\, e^{\delta(x) - ia(x)} & -e^{\delta(x)-ia(x)} \\ e^{\delta(x)+ia(x)} & \alpha(x)\, e^{\delta(x)+ia(x)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Заменяем (15) системой дифференциальных уравнений для $A(x)$ и $B(x)$

$$L\, dA / dx = -(i\beta e^{\delta - ia} + 1) A + i e^{\delta - ia} B, \tag{15'}$$

$$L\, dB / dx = -i e^{\delta + ia} A - (1 + i\alpha e^{\delta + ia}) B$$

(отброшенные члены малы при условии $e^{-\delta} \gg L_1 / L$). Полученная система может быть решена в ВКБ-приближении

$$\begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix} \sim k^{-1/2} \exp\left\{\pm i \int^{x} k(x, E)\, dx\right\}, \quad k(x, E) \approx \ln[\mu(x, E) - 1]. \tag{16}$$

Из (16) видно, что собственные значения E определяются видом функции $k(x, E)$, причем характер зависимости $k(x)$ может быть различным для различных значений E.

Для дальнейшего выберем конкретный вид периодической части потенциала

$$U(z) = U_0 \cos^2 \Omega z. \tag{17}$$

Из уравнений (6) находим

$$a = \frac{2}{\Omega}\left\{E\left(\frac{\pi}{2}, q\right) - (1 - q^2) F\left(\frac{\pi}{2}, q\right)\right\},$$

$$\delta = \frac{2}{\Omega}\left\{E\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{1-q^2}\right) - q^2 F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{1-q^2}\right)\right\},$$

где F, E — эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода. Неравенству (10) соответствует $1 - q^2 \ll 1$. Отсюда

$$a \sim \frac{2}{\Omega}\left\{1 - \frac{1}{4}(1 - q^2) \ln \frac{16\sqrt{e}}{1 - q^2}\right\},$$

$$\delta \sim \frac{\pi}{2\Omega}(1 - q^2). \tag{18}$$

Из (11) получаем:

$$\varphi \sim \frac{1 - q^2}{2\Omega} \ln\left(\frac{1 - q^2}{\Omega}\right) - \frac{1 - q^2}{2\Omega}(\ln 2 - C), \tag{19}$$

где C — постоянная Эйлера, или

$$a + \varphi \sim \frac{2}{\Omega} - \frac{1 - q^2}{2\Omega} \ln \Omega.$$

При Ω, $U_1 = \text{const}$ разрешенные зоны энергии определяются, согласно (9), из выражения:

$$\frac{3\pi}{4} \gtrsim \frac{2}{\Omega}\left\{1 - \frac{1}{4}(1 - q^2) \ln \Omega\right\} - 2n\pi \gtrsim \frac{\pi}{4}. \tag{20}$$

---

* Ширина запрещенных зон в этом случае того же порядка.

Значения $\pi/4$ и $3\pi/4$ соответствуют краям зоны. Из (20) для ширины Δ разрешенной энергетической зоны получаем уточненное выражение (14)

$$\Delta \simeq \pi U_0 \Omega / \ln (16\sqrt{e} / \bar{\Omega}).$$

Формулы (18)—(20), в соответствии с изложенным методом, получены без учета зависимости q от x. Учтем теперь эту зависимость. Согласно (16), квазиимпульс частицы $k(x, E)$ можно рассматривать как «импульс» для функций $A(x)$, $B(x)$, удовлетворяющих уравнению типа Шредингера с энергией $[\ln (\mu(x) - 1)]^2$.

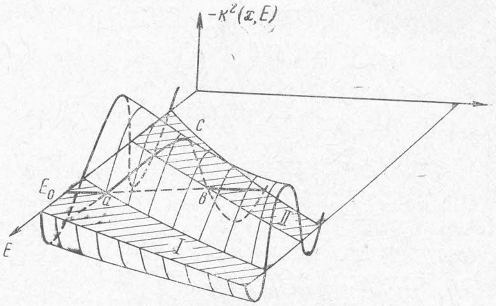

Рис. 2

Для обхода точек поворота $k(x_0, E) = 0$ пользуемся методом, изложенным в п. 1. Матрица перехода определяется аналогичным образом. Точкам поворота соответствуют края энергетических зон, определяемых уравнением (20), где теперь надо считать q зависящим от x согласно (12). На рис. 2 изображена поверхность $k^2(x, E)$. Области I и II соответствуют разрешенным зонам энергии. Плоскость $E = E_0$ вырезает на поверхности $k^2(x, E)$ кривую $k^2(x, E_0)$, имеющую «горбы» между зонами и «ямы» внутри зон. Таким образом, возможен туннельный переход между зонами. Точки a и b являются точками поворота. Приведенный пример является одним из возможных следствий «неоднородности», связанной с наличием поля $U_1(x)$. При $x > x_0$ в области энергий, для которых $k^2(x_0, E) < 0$, зоны исчезают, а в области энергий, где $k^2(x_0, E) > 0$, спектр становится сплошным. Если $k^2(x, E)$ в некоторой области энергий имеет вид ямы, то спектр вырождается в точечный.

Во всех этих случаях неквазиклассические поправки определяются с помощью матрицы перехода типа (5) для коэффициентов A_1, B_1 функций

$$\psi_1(x) = A_1 A(x) + B_1 B(x),$$

где $A(x)$ и $B(x)$ — квазиклассические решения системы (15^1). Волновая функция представляется, таким образом, в виде

$$\Psi = \psi_1(x) \psi(x).$$

Заметим, что хотя энергетические поверхности $k^2(x, E)$ были приведены для $\delta \to 0$, однако аналогичные рассуждения легко провести для произвольных δ.

В заключение выражаем благодарность Р. З. Сагдееву за ценные советы и обсуждения.

Новосибирский государственный
университет

Поступило
7 I 1965

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] I. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev., 97, 869 (1955). [2] И. М. Лифшиц, УФН, 33, в. 4, 617 (1964). [3] H. M. James, Phys. Rev., 76, 1611 (1949). [4] P. Butcher, D. Hum E. Pike, Proc. Roy, Soc., A280, № 1381, 185 (1964). [5] А. М. Дыхне, ЖЭТФ, 40, 1423 (1961). [6] E. C. Stueckelberg, Helv. phys. acta, 5, № 6, 369 (1932). [7] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., 1962.