Задача Кронига–Пенни для потенциала бипараболической формы: квазисвободное движение частицы

© А.Ж. Мурадян

Ереванский государственный университет,
375049 Ереван, Армения

E-mail: yndanfiz@sun.ysu.am

(Поступила в Редакцию 30 сентября 1998 г.)

Определены блоховские состояния частицы в одномерном периодическом поле бипараболической формы. Решения представлены через вырожденные гипергеометрические функции. Показано, что первый член разложения Трикоми для вырожденных гипергеометрических функций при этом представляет квазисвободное надбарьерное движение частицы и совпадает с точным решением Кронига–Пенни для прямоугольного потенциала.

Одномерный периодический потенциал [1] в теории твердого тела является основой для качественного (грубого) описания зонной структуры энергетического спектра электронов и их волновых функций [2–4]. Для описания квазисвободного движения хорошо известно приближение слабой связи, при котором фактически используется тейлоровское разложение по параметру, пропорциональному энергии взаимодействия. В [5] предложена модифицированная теория возмущений, которая по содержанию является аналогом метода Леннарда–Джонса [6].

В настоящей статье получены блоховские (стационарные) решения для состояний частицы в поле бипараболического потенциала. Для описания квазисвободного движения при этом использовано второе разложение Трикоми вырожденной гипергеометрической функции по бесселевым функциям [7]. Получено, что это разложение является более "мягким" относительно параметра взаимодействия, чем тейлоровское разложение, поскольку сохраняет основное содержание решений для периодического потенциала — зонную структуру энергетического спектра — уже в первом приближении.

1. Бипараболический потенциал и точные блоховские решения

Бипараболическим названо одномерное периодическое поле, потенциальная энергия частицы в котором представляется в виде периодической функции, образованной из обрезанных и поочередно перевернутых парабол (рис. 1)

$$U(x) = \frac{1+(-1)^n}{2}U_{\min} + \frac{1-(-1)^n}{2}U_{\max} + (-1)^n k\left(x - \frac{nl}{2}\right)^2, \qquad (1)$$

где $n = 0, \pm1, \pm2, \dots$, а при каждом значении n координата x меняется в пределах

$$\frac{2n-1}{4}l \leqslant x \leqslant \frac{2n+1}{4}l.$$

Четным значениям n соответствуют вогнутые, а нечетным значениям — выпуклые области потенциальной кривой относительно среднего значения $(U_{\min}+U_{\max})/2$. Величины $U_{\min}$ и $U_{\max}$ есть минимальное и максимальное значения потенциальной энергии, а l — ее пространственный период. Непрерывность потенциала и его первой производной обеспечивается выбором значения "упругой" постоянной $k = 8U/l^2$, где $U = U_{\max} - U_{\min}$ есть глубина периодической потенциальной энергии. Начало координат совмещено с минимумом вогнутой области при $n = 0$.

Решение стационарного уравнения Шредингера (СУШ) с квадратичной зависимостью (1) потенциальной энергии от координаты представим с помощью вырожденных гипергеометрических функций Φ. В первой области ($n = 0$, $-l/4 \leqslant x \leqslant l/4$; см. рис. 1) для волновой функции частицы имеем

$$\Psi_I(x) = A_a u_a(x) + A_b u_b(x), \qquad (2)$$

где

$$u_a(x) = e^{-\eta^2x^2/2}\Phi\left(\alpha, \frac{1}{2}; \eta^2x^2\right), \qquad (3)$$

$$u_b(x) = \eta x e^{-\eta^2x^2/2}\Phi\left(\alpha+\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \eta^2x^2\right) \qquad (4)$$

есть два неизвестных решения СУШ, в которых приняты следующие обозначения:

$$\eta = 2\left(\frac{MU}{\hbar^2l^2}\right)^{1/4}, \quad \alpha = \frac{1}{4}(1-\lambda+V_{\min}),$$

$$V_{\min} = \frac{l}{2\hbar}\sqrt{\frac{M}{U}}U_{\min}, \quad \lambda = \frac{l}{2\hbar}\sqrt{\frac{M}{U}}E, \qquad (5)$$

E и M есть энергия и масса частицы, A_a и A_b — неизвестные пока коэффициенты, которые будут определены из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной совместно с условием нормировки.

Нелишне заметить, что помимо U в задачу входит и второй энергетический параметр, который можно записать в виде $E_r = \hbar^2k^2/2M$ по аналогии с энергией отдачи

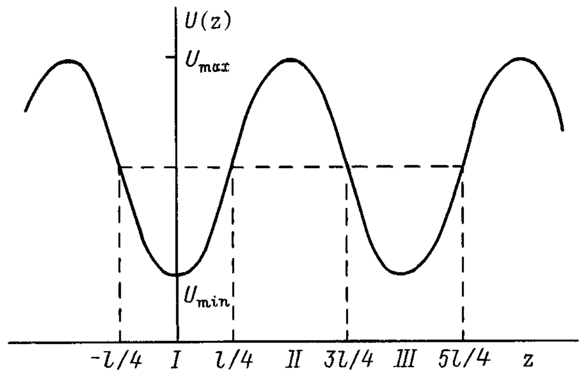

Рис. 1. Вид бипараболического потенциала. Снизу отмечены первая (I; $n = 0$), вторая (II; $n = 1$) и третья (III, $n = 2$) области.

при поглощении–излучении фотона, $k = 2\pi/l$. При этом аргументы в выражениях (3), (4) и безразмерная энергия частицы λ будут иметь вид

$$\eta^2 x^2 = 4\pi\sqrt{\frac{2U}{E_r}}\left(\frac{x}{l}\right)^2, \quad \lambda = \pi\frac{E}{\sqrt{2UE_r}}. \qquad (6)$$

Пространственный масштаб задачи определяется отношением этих двух параметров U и E_r, а энергетический масштаб — их произведением.

Во второй области потенциальной энергии ($n = 1$; $l/4 \leqslant x \leqslant 3l/4$) имеем

$$\Psi_{II}(x) = B_a v_a(x) + B_b v_b(x), \qquad (7)$$

где B_a и B_b есть новые постоянные, а $v_a(x)$ и $v_b(x)$ получаются из выражений $u_a(x)$ и $u_b(x)$ с помощью замен α и $V_{\min}$ на

$$\beta = \frac{1}{4}(1 - i(\lambda - V_{\max})), \quad V_{\max} = \frac{l}{2\hbar}\sqrt{\frac{M}{U}}U_{\max}$$

соответственно. Независимая переменная x^2 при этом заменяется на $-i(x - l/2)^2$.

В третьей области ($n = 2$, $3l/4 \leqslant x \leqslant 5l/4$) решение СУШ, согласно условию Блоха, есть

$$\Psi_{III}(x) = e^{\frac{i}{\hbar}pl}\Psi_I(x - l), \qquad (8)$$

где P — квазиимпульс частицы.

После стандартных требований непрерывности в граничных точках ($x = l/4$ и $x = 3l/4$) получаем дисперсионное соотношение вида

$$\cos\frac{pl}{\hbar} = \frac{G_{ab}G_{ba} + G_{aa}G_{bb}}{G_{ab}G_{ba} - G_{aa}G_{bb}}, \qquad (9)$$

где

$$G_{\mu\nu} = u_\mu v'_\nu - v_\nu u'_\mu|_{x=l/2}, \qquad (10)$$

$\mu, \nu = a, b$. Штрихи у функций u'_μ и v'_ν означают, как обычно, производные по аргументу (т.е. по x). При получении вида (10) использованы соотношения, выражающие значения функций $u_\mu(x)$, $v_\nu(x)$ и их производных в точке $x = 3l/4$ через соответствующие значения в точке $x = l/4$. Эти соотношения получены с помощью явных выражений вышеупомянутых величин. Условия непрерывности также констатируют следующие связи между коэффициентами A_μ и B_μ:

$$A_b = iA_a\frac{G_{ab}}{G_{bb}}\operatorname{tg}\frac{pl}{2\hbar}, \quad B_a = A_a\frac{G_{ab}}{\Delta}\left(1 + i\operatorname{tg}\frac{pl}{2\hbar}\right),$$

$$B_b = A_a\frac{G_{aa}}{\Delta}\left(-1 + i\operatorname{ctg}\frac{pl}{2\hbar}\right), \qquad (11)$$

где Δ есть Вронскиан решений для второй области кривой потенциальной кривой (рис. 1). Для определения оставшейся неизвестной A_a следует к (11) добавить также условие нормировки [4].

2. Квазисвободное движение частицы

Для вырожденных гипергеометрических функций, которые определяют волновую функцию и энергетический спектр частицы в бипараболическом периодическом поле, будем использовать второе разложение Трикоми [7]

$$e^{-z/2}\Phi(h, \sigma + 1; z) = \Gamma(\sigma + 1)(xz)^{-\sigma/2}$$

$$\times\sum_{n=0}^{\infty} c_n\left(\varkappa, \frac{1+\sigma}{2}\right)\left(\frac{z}{4\varkappa}\right)^{n/2} J_{\sigma+n}(2\sqrt{xz}), \quad (12)$$

где $\Gamma(\cdot)$ — гамма функция, $\varkappa = (1 + \sigma)/2 - h$, $J_m(\cdot)$ — функция Бесселя, а коэффициенты c_n определяются из рекурентного соотношения

$$(n + 1)c_{n+1}(\varkappa, r) = (n + 2r - 1)c_{n-1}(\varkappa, r)$$

$$- 2\varkappa c_{n-2}(\varkappa, r), \qquad (13)$$

где $n = 2, 3, \ldots$ при $c_0 = 1$, $c_1 = 0$, и являются многочленами степени $[n/3]$ по $\varkappa$.

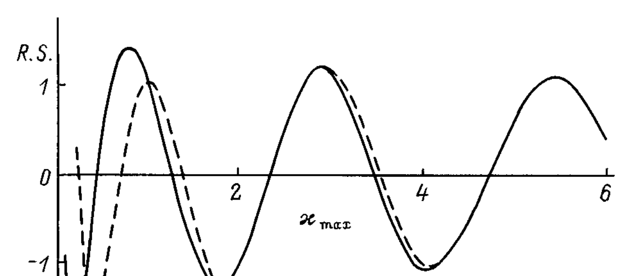

Рис. 2. Правая часть ($R.S.$) дисперсионного соотношения (9) в зависимости от энергии частицы (рассчитанной относительно максимального значения периодической потенциальной энергии). Сплошная линия соответствует сохранению первого и второго отличных от нуля членов в разложении (12), штриховая — первого. Графики представлены для случая $U_{\min}/E_r = -7$; $U_{\max}/E_r = -5$.

Простые подстановки показывают, что входящее в (12) отношение $z/4\varkappa$ по модулю меньше единицы, если $E - U_{\max} > U$, то есть если значение энергии частицы находится выше максимального значения потенциальной энергии. При этом частица совершает надбарьерное движение; ряд (12) абсолютно сходится и можно сохранить ограниченное число слагаемых.

Если сохранить только первый член разложения во всех выражениях u_μ, u'_μ, v_ν и v'_ν, то дисперсионное соотношение (9) и волновые функции (2), (7) принимают элементарный вид

$$\cos\frac{pl}{\hbar} = \cos\frac{1}{2}k_{\min}l\cos\frac{1}{2}k_{\max}l - \frac{1}{2}\left(\frac{k_{\min}}{k_{\max}} + \frac{k_{\max}}{k_{\min}}\right)\sin\frac{1}{2}k_{\min}l\sin\frac{1}{2}k_{\max}l, \quad (14)$$

$$\Psi_I(x) = A_a\cos k_{\min}x + \frac{A_b}{2\sqrt{\varkappa_{\min}}}\sin k_{\min}x, \quad (15)$$

$$\Psi_{II}(x) = B_a\cos k_{\max}(x - l/2) + B_b\frac{\sqrt{-i}}{2\sqrt{\varkappa_{\max}}}\sin k_{\max}(x - l/2), \quad (16)$$

где

$$k_{\min,\max} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2M(E - U_{\min,\max})},$$

$$\varkappa_{\min,\max} = \frac{\pi(E - U_{\min,\max})}{4\sqrt{E_rU}}.$$

Этот результат в точности совпадает с видом решения Кронига–Пенни для прямоугольного потенциала. При надбарьерном квазисвободном движении частица как бы "чувствует" лишь глубину и период периодического потенциала. Можно надеяться, что это свойство сохранится и в общем случае периодического потенциала; однако это требует доказательства.

Члены разложения (12), начиная со второго, учитывают вклад непрямоугольного характера разложения и вносят вклад, естественно, в состояния с относительно низколежащими энергетическими уровнями. Для иллюстрации на рис. 2 представлены графики для первой части дисперсионного соотношения с сохранением одного (прямоугольное приближение) и двух членов разложения. Видно, что начиная с третьей–четвертой зоны решения практически совпадают.

Выражаю благодарность М.Л. Тер-Микаеляну и Э.М. Казаряну за обсуждение результатов.

Работа выполнена в рамках научной темы № 96-901, финансируемой из централизованных государственных финансовых источников Армении, а также Инженерного Центра Национальной АН Армении.

Список литературы

[1] R.L. Kronig, W. Penny. Proc. R. Soc. London **130**, 499 (1931).
[2] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Т. 1. Мир, М. (1979). С. 138, 157.
[3] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. Наука, М. (1976). С. 134.
[4] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. Наука, М. (1979). С. 272.
[5] С.Ю. Карпов, О.В. Константинов, М.Э. Райх. ФТТ **22**, 3402 (1980).
[6] Н. Мотт, И. Снеддон. Волновая механика и ее применения. Наука, М. (1966). С. 97.
[7] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Вып. 1. Наука, М. (1973). С. 265.