Міністерство освіти та науки України
Криворізький державний педагогічний університет
Запорізький інститут економіки та інформаційних технологій

Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в науці, економіці та освіті

Збірник наукових праць

Том 1

Кривий Ріг
Видавничий відділ КДПУ
2001

ОСОБЕННОСТИ ПРЕДЕЛЬНОГО ПЕРЕХОДА ОТ КОНЕЧНОЙ К БЕСКОНЕЧНОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛА

В.Н. Евтеев
г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический университет

Сравним дисперсионные уравнения одномерных моделей бесконечного и конечного кристаллов. Первая модель приводит к выражению:

$$t/2=\cos((2\pi l)/n) \tag{1}$$

Здесь t – след трансфер-матрицы, l – квантовое число, n – число узлов в основном объеме.

Точное решение модели ограниченного кристалла с открытыми граничными условиями дает следующее дисперсионное уравнение для зонных состояний:

$$t/2=\cos((l\pi\text{-}\Phi_0)/n) \tag{2}$$

здесь Φ_0 – дополнительная фаза, зависящая от энергии. Поскольку Φ_0 не зависит от квантового числа, то при увеличении числа узлов n, дополнительной фазой Φ_0/n можно пренебречь и уравнение (2) становится отличным от уравнения (1) только постоянным множителем в фазе, равном 2. Таким образом, попытка сблизить предсказания обеих рассматриваемых моделей для случая ограниченного, но большого кристалла приводит к противоречию. Однако границы зоны в обеих моделях совпадают и определяются условием $t^2=4$.

Модель ограниченного кристалла объясняет появление локальных граничных состояний, и предсказания условий их существования совпадают с соответствующими условиями в модели полуограниченного кристалла. Покажем, что модель конечного одномерного кристалла приводит в предельном случае к дисперсионному уравнению Тамма.

Трансфер-матрица повторяющегося фрагмента в задаче Кронига-Пенни:

$$\hat{T}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ \Omega & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\xi & \dfrac{a\cdot\sin\xi}{\xi}\\ \dfrac{-\xi\cdot\sin\xi}{a} & \cos\xi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\xi & \dfrac{a\cdot\sin\xi}{\xi}\\ \Omega\cdot\cos-\dfrac{\xi\cdot\sin\xi}{a} & \Omega\dfrac{a\cdot\sin\xi}{\xi}+\cos\xi\end{pmatrix} \tag{3}$$

где a – размер кристаллической ячейки, $\xi = a/\hbar \cdot \sqrt{2mE}$, Ω – непроницаемость барьера. Поскольку нас будет интересовать дисперсионное уравнение для полуограниченной среды, то, с целью упрощения выкладок, рассмотрим исходное уравнение для случая с одинаковыми берегами [1]:

$$\lambda_1^n((\lambda_1-\lambda_2)\chi+(\gamma+\beta\chi^2))-\lambda_2^n((\lambda_1-\lambda_2)\chi-(\gamma+\beta\chi^2))=0 \qquad (4)$$

Здесь β и γ недиагональные элементы трансфер-матрицы, а λ_1 и λ_2 ее собственные значения, χ – величина, характеризующая граничные условия. Так как речь идет о дисперсионном уравнении для нахождения локальных поверхностных состояний, то для следа трансфер-матрицы имеем $t^2>4$. Тогда собственные значения трансфер-матрицы λ_1 и λ_2 будут иметь вещественные, не равные друг другу значения. Выберем из них большее по абсолютной величине значение и разделим на его n-ную степень уравнение. Устремляя n к бесконечности, получаем уравнение:

$$(t^2-4)\chi=(\gamma+\beta\chi^2)^2 \qquad (5)$$

Подставив значения элементов трансфер-матрицы в это уравнение, получим:

$$\xi^2\mathrm{ctg}^2\xi-2/(\Omega a)(a^2\chi^2+\xi^2)\xi\,\mathrm{ctg}\xi+a^2\chi^2/\Omega^2+1/\Omega^2\,(2\xi^2-\Omega^2a^2)\chi^2+ \\ +\xi^4/(\Omega^2a^2)=0 \qquad (6)$$

Решение квадратного уравнения (6) приводит к дисперсионному уравнению для таммовских поверхностных состояний:

$$\xi\mathrm{ctg}\xi=1/(\Omega a)\,(a^2\chi^2+\xi^2)\pm a\chi \qquad (7)$$

или, используя обозначения, принятые в литературе [2]:

$$\xi\mathrm{ctg}\xi=q^2/(2P)\pm\sqrt{q^2-\xi^2} \qquad (8)$$

здесь $a^2\chi^2=q^2-\xi^2$; $\Omega a=2P$; $q=a/\hbar\sqrt{2mU_0}$

Численный счет подтверждает вывод, сделанный с использованием предельного перехода о том, что величина отщепления поверхностного состояния с ростом числа повторяющихся фрагментов потенциала перестает зависеть от их числа.

Различие между моделями определяется областью интегрирования уравнения Шредингера и симметриями, присущими этой области. Мы уже указывали на то, что точно решаемая модель ограниченного кристалла для делокализованных состояний приводит к тем же значениям параметров, определяющих спектральную зонную структуру, что и модель бесконечного кристалла. Отличие состоит лишь в наличии локальных поверхностных состояний при ограничении цикличности. Мы показали, как осуществляется предельный переход от модели ограниченного кристалла к модели полуограниченного. Но возможен предельный переход и к модели бесконечного кристалла. Рассмотрим дисперсионное уравнение для локальных состояний в модели ограниченного кристалла $t/2=\text{ch}(\Phi_0/n)$; здесь Φ_0 — независимая от квантового числа величина. Если в этом уравнении устремить $n\to\infty$, то решения станут возможны лишь на границе зоны, то есть уже не будут локальными, так как приведенное уравнение работает лишь при $t^2>4$. По мере увеличения n, решения обсуждаемого уравнения будут все ближе и ближе «подходить» к границе зоны и в предельном случае при $n\to\infty$ сольются с зоной. Полученный вывод соответствует переходу от модели ограниченного кристалла к модели бесконечного, в которой отсутствуют поверхностные состояния, из-за отсутствия самих граничных поверхностей. Но этот вывод формально противоречит выводу, полученному в предыдущем пункте, с тем, что величина отщепления локального состояния от зонных с увеличением n перестает зависеть от числа элементарных ячеек.

На первый взгляд, при предельном переходе от модели конечного кристалла к модели неограниченного ($n\to\infty$) возникает единственная ситуация. При этом неявно предполагается независимость ее от способа получения бесконечного кристалла. В нашем случае имеет место не только непрерывное стремление числа ячеек к бесконечности, но и изменение топологии области пространства, на которой рассматриваются периодически повторяемые фрагменты потенциала. В случае модели ограниченного потенциала – это отрезок, в случае полуограниченного кристалла – луч, и, наконец, для модели бесконечного кристалла мы рассматриваем бесконечную прямую. Чтобы подчеркнуть топологическую разницу между упомянутыми геометрическими фигурами, вспомним, что луч топологически эквивалентен окружности, отрезок соответствует окружности с наложенной точкой, а бесконечная прямая, с точки зрения непрерывной деформации, эквивалентна окружности с выколотой точкой. Изменение топологии может иметь решающее значение для обсуждаемых моделей. Действительно, осуществляя в модели ограниченного кристалла различными способами предельный переход ($n \to \infty$), получим модели различных физических объектов полуограниченного и неограниченного кристаллов, обладающих различными пространственными характеристиками, такими как однородность и анизотропность. При этом отсутствует плавный переход к трансляционной симметрии, подобно тому, как поворотная симметрия правильного многоугольника, при увеличении количества сторон, постепенно приближается к симметрии окружности. Трансляционная симметрия либо имеет место, либо нет. На первом шаге при моделировании бесконечного кристалла, обладающего трансляционной симметрией, делается вывод о трансляционной инвариантности волновой функции (теорема Блоха) [3]. Затем вводят, так называемый, основной объем. И далее, с целью воспользоваться упрощающими достоинствами трансляционной инвариантности, применяют циклические граничные условия к основному объему. Тем не менее, как показывают численные эксперименты с одномерной моделью, использование циклических граничных условий не приводит к трансляционной инвариантности волновой функции. Для того чтобы существовала трансляционная инвариантность волновой функции, недостаточно циклических условий на границе основного объема, необходимо также выполнение циклических условий на границах каждой ячейки, а это возможно лишь для неограниченного кристалла. Использование циклических граничных условий связано с тем, что собственные состояния даже в одномерном случае оказываются двукратно вырожденными, в то время как для нециклических граничных условий вырождение отсутствует. Применение периодических граничных условий приводит к тому, что возникают лишь нечетные двукратно вырожденные уровни.

Литература:

1. Glushko E.Ya, Evteev V.N. Methods and Aspects of Exact Solvable Models in Multi-Quantum Well Structures. – Krivoy Rog, 1994. – 56 с. (препр. / KGPI 0010)

2. Дэвисон С., Левин Дж. Поверхностные (Таммовские) состояния. – М.: Мир, 1973. – 232 с.

3. Bloch F.// Zs. Physik. – 1928. – Vol. 52. – P. 555