

УДК 517.938

ТОЧЕЧНЫЙ СПЕКТР ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ДВУХ СОЕДИНЕННЫХ ПОЛУКРИСТАЛЛОВ С ПОТЕНЦИАЛАМИ КРОНИГА-ПЕННИ

А.Н. Скорынина

В рамках модели Кронига-Пенни рассматривается спектральная задача для двух соединенных одномерных полукристаллов. Изучаются два способа их соединения. Показывается существование связанных состояний. Описывается зависимость собственных значений энергии от параметров системы. Используется теория матриц монодромии.

Ключевые слова: спектр, одномерный оператор Шредингера, периодический потенциал, полукристалл.

Введение

Состояние квантового электрона в одномерном кристалле описывается одномерным стационарным уравнением Шредингера с периодическим потенциалом $p(x)$:

$$-f''(x) + f(x)p(x) = Ef(x), \quad E \in \mathbb{R}. \quad (1)$$

Случай, когда потенциал представляет собой периодический набор дельта-функций с периодом T ,

$$p(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \alpha \delta(x - nT), \quad (2)$$

носит название модели Кронига-Пенни [1].

С математической точки зрения задача (1, 2) сводится [2] к изучению дискретного спектра оператора Шредингера

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} \quad (3)$$

с областью определения

$$\begin{aligned} \text{dom } H &= \{f \in H^{2,1}(R) \cap H^{2,2}(R - \Lambda) \mid f'(nT+) - f'(nT-) = \alpha f(nT), n \in \mathbb{Z}\}, \\ \Lambda &= \{nT, n \in \mathbb{Z}\}. \end{aligned} \quad (4)$$

В работе [1] были получены соотношения для волновых функций и энергетического спектра в случае потенциала (2), а также установлено, что энергетический спектр представляет собой чередующиеся последовательности разрешенных и запрещенных энергетических зон. Таким образом, волновое уравнение (1) имеет решение в виде незатухающих волн только для определенных разрешенных энергетических зон. Задача (1) с потенциалами вида (2) рассматривалась в [2]. В работе доказано, что оператор (3) имеет абсолютно непрерывный спектр. Описаны зоны спектра, доказано, что они не вырождены. К работам, посвященным данной теме, относятся [3–9].

В [3] изучены спектральные асимптотики оператора (3) для положительной части его спектра, доказано, что спектр оператора – чисто абсолютно непрерывный и заполняет бесконечное число зон, разделенных лакунами. В статье [4] рассмотрен оператор вида

$$H_1(t) = -\frac{d^2}{dx^2} + p_1(x, t) + q_1(x, t),$$

где p_1 – периодический потенциал; q_1 – потенциал с компактным носителем на бесконечной прямой. Доказано, что спектр оператора состоит из абсолютно непрерывной части плюс конечное число простых собственных значений в каждой неограниченной непустой спектральной лакуне. Определены асимптотики собственных значений.

При $0 \leq x < +\infty$ имеем модель полубесконечного кристалла, которая изучалась в [2, 4, 10]. Общим для перечисленных выше работ было использование теоремы Блоха, на основе которой строилось продолжение волновой функции на период. Другим подходом является решение уравнения Шредингера с помощью матрицы монодромии. Этот способ применяется, например, в [3, 11].

Большой интерес представляет модель двух полукристаллов, соединенных в нуле. В [6] изучены спектральные свойства оператора

$$H_2(t) = -\frac{d^2}{dx^2} + q_2(x, t)$$

в пространстве $L_2(R)$, где потенциал определен следующим образом:

$$q_2 = \begin{cases} p_2(x+t), & x > 0, \\ p_2(x), & x < 0, \end{cases}$$

p_2 – периодический потенциал и $t \in R$ – параметр сдвига. В работе доказывается, что для каждого t абсолютно непрерывный спектр состоит из интервалов, разделенных лагунами, приводится доказательство того факта, что в каждой непустой лагуне существует одно собственное значение и один резонанс.

В работе [11] решается уравнение (1), где

$$p(x) = \begin{cases} q_{per}(x), & x \leq 0, \\ q_{def}(x), & x \in (0, 1), \\ q_{per}(x-1), & x \geq 1, \end{cases}$$

здесь q_{per} – периодический потенциал. Изучается существование точечного спектра в лагунах существенного спектра и определяется количество таких собственных значений.

Целью данной работы является изучение дискретного спектра оператора (3) для соединенных полукристаллов с областью определения (4). При этом используются матрицы монодромии. В работе рассматриваются два варианта соединения полукристаллов: наличие и отсутствие дельта-функции в точке соединения; указываются ограничения на параметры модели, при которых спектр соответствующего оператора дискретный.

Общая схема построения решения

Пусть имеет место следующее соотношение:

$$\begin{pmatrix} f(T) \\ f'(T) \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} f(0) \\ f'(0) \end{pmatrix}.$$

Тогда \mathbf{M} называется матрицей монодромии. Она служит для продолжения решения на всю прямую.

Сначала рассмотрим модель одного полукристалла. Решим уравнение (1) на отрезке $[0, T]$ при потенциале (2). Если потенциал нулевой, то матрица монодромии имеет следующий вид:

$$\mathbf{M}_0 = \begin{pmatrix} \cos kT & \frac{\sin kT}{k} \\ -k \sin kT & \cos kT \end{pmatrix},$$

где $k = \sqrt{E}$. Исходная задача отличается от предыдущей наличием дельта-функции в точке $x = T$, что эквивалентно выполнению условия

$$f'(T+0) - f'(T-0) = \alpha f(T).$$

Матрица монодромии для задачи с бесконечным потенциальным барьером в одной точке имеет вид

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \alpha & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, матрица монодромии для (1) определяется выражением

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_0 = \begin{pmatrix} \cos kT & \frac{\sin kT}{k} \\ \alpha \cos kT - k \sin kT & \frac{\alpha}{k} \sin kT + \cos kT \end{pmatrix}.$$

С помощью полученной матрицы монодромии продолжим решение на всю прямую. Необходимо учесть тот факт, что решение задачи (1) ищется в пространстве квадратично-интегрируемых функций, а потому естественным является накладываемое ограничение на собственные числа матрицы \mathbf{M} : $|\lambda| < 1$.

Собственные числа матрицы \mathbf{M} задаются следующими выражениями:

$$\lambda^\pm = \cos kT + \frac{\alpha}{2k} \sin kT \pm \sqrt{-\sin^2 kT + \frac{\alpha}{2k} \sin 2kT + \frac{\alpha^2}{4k^2} \sin^2 kT}.$$

Собственные векторы, соответствующие этим собственным значениям, имеют вид

$$X^{\pm} = \left(\begin{array}{c} 1 \\ \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\alpha k \operatorname{ctg} kT + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \end{array} \right).$$

Соединенные полукристаллы

Дальнейшей областью рассмотрения являются два полубесконечных кристалла с различными периодами T_1, T_2 для отрицательной и положительной полупрямых. Выражения для собственных значений и собственных векторов матриц монодромии для левого $(\lambda_1^+, \lambda_1^-, X_1^+, X_1^-)$ и правого $(\lambda_2^+, \lambda_2^-, X_2^+, X_2^-)$ полукристаллов имеют следующий вид:

$$\lambda_1^{\pm} = \cos kT_1 + \frac{\alpha}{2k} \sin kT_1 \pm \sqrt{-\sin^2 kT_1 + \frac{\alpha}{2k} \sin 2kT_1 + \frac{\alpha^2}{4k^2} \sin^2 kT_1},$$

$$X_1^{\pm} = \left(\begin{array}{c} 1 \\ \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\alpha k \operatorname{ctg} kT_1 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \end{array} \right).$$

$$\lambda_2^{\pm} = \cos kT_2 - \frac{\alpha}{2k} \sin kT_2 \pm \sqrt{-\sin^2 kT_2 - \frac{\alpha}{2k} \sin 2kT_2 + \frac{\alpha^2}{4k^2} \sin^2 kT_2},$$

$$X_2^{\pm} = \left(\begin{array}{c} 1 \\ \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{-\alpha k \operatorname{ctg} kT_2 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \end{array} \right).$$

Первый вариант соединения полукристаллов. В точке соединения полукристаллов нет дельта-функции. При выполнении описанных выше необходимых условий достаточным условием существования собственного значения энергии является наличие общего собственного вектора у матриц монодромии левой и правой полуосей. Собственные векторы матриц монодромии для левого и правого полукристаллов исследуем на попарное равенство для выполнения условия «склейки» в нуле.

При $X_1^+ = X_2^+$ допустимая область определяется из системы

$$\left\{ \begin{array}{l} k = \frac{\pi n}{T_1 + T_2}, \quad n \in Z, \\ T_2 \neq \frac{n - n_1}{n_1} T_1, \quad n, n_1 \in Z, \\ T_2 \neq \frac{n_2}{n - n_2} T_1, \quad n, n_2 \in Z, \\ |\lambda_i^+| < 1, \quad i = 1, 2. \end{array} \right. \quad (5)$$

При $X_1^+ = X_2^-$ допустимая область определяется из системы

$$\left\{ \begin{array}{l} k = \frac{\pi n}{T_1 + T_2}, \quad n \in Z, \\ \operatorname{ctg} kT_1 = \frac{4 - \alpha^2}{4\alpha k}, \\ T_2 \neq \frac{n - n_1}{n_1} T_1, \quad n, n_1 \in Z, \\ T_2 \neq \frac{n_2}{n - n_2} T_1, \quad n, n_2 \in Z, \\ |\lambda_1^+| < 1, \\ |\lambda_2^-| < 1. \end{array} \right. \quad (6)$$

При $X_1^- = X_2^-$ допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k = \frac{\pi n}{T_1 + T_2}, n \in Z, \\ |\lambda_i^+| < 1, i = 1, 2. \end{cases} \quad (7)$$

При $X_1^- = X_2^+$ допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k = \frac{\pi n}{T_1 + T_2}, n \in Z, \\ \text{ctg } kT_1 = \frac{4 - \alpha^2}{4\alpha k}, \\ T_2 \neq \frac{n - n_1}{n_1} T_1, n, n_1 \in Z, \\ T_2 \neq \frac{n_2}{n - n_2} T_1, n, n_2 \in Z, \\ |\lambda_1^-| < 1, \\ |\lambda_2^+| < 1. \end{cases} \quad (8)$$

Зафиксируем T_1 и положим $n = 2$ в формулах (5)–(8). Допустимая область в координатах (α, T_2) изображена на рис. 1, а. Рассмотрим подробнее ситуацию

$$T_2 = T - \varepsilon, T_1 = T + \varepsilon. \quad (9)$$

Зависимость волнового числа от разности периодов решеток изображена на рис. 1, б. Допустимые значения волнового числа изображены на рис. 1, в.

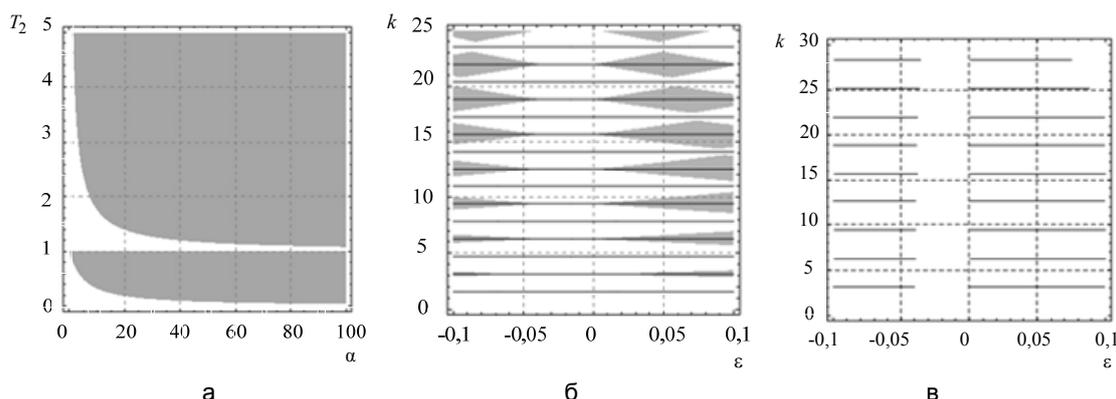


Рис. 1. Допустимая область (обозначена серым цветом) на плоскости параметров системы (а); зависимость волнового числа от разности периодов решеток (серым цветом обозначены допустимые области, черным цветом – значения волнового числа) (б); допустимые значения волнового числа (в)

При $\varepsilon \rightarrow 0$ существуют связанные состояния. Это не противоречит теоремам о спектре бесконечного кристалла вследствие дефекта в нуле.

Второй вариант соединения полукристаллов. В точке соединения присутствует дельта-функция. Для выполнения условия соединения в нуле собственные векторы матриц монодромии для левого и правого полукристаллов должны удовлетворять следующему уравнению:

$$X_1^\pm = \mathbf{M}_1 X_2^\pm. \quad (10)$$

При $X_1^+ = X_2^+$ уравнение (10) преобразуется к виду

$$k(\text{ctg } kT_2 + \text{ctg } kT_1)^2 + 2\alpha(\text{ctg } kT_2 - \text{ctg } kT_1) = -4k, \quad (11)$$

а допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k(\text{ctg } kT_2 + \text{ctg } kT_1)^2 + 2\alpha(\text{ctg } kT_2 - \text{ctg } kT_1) = -4k, \\ \alpha + \sqrt{-\alpha k \text{ctg } kT_2 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \geq 0, \\ -\alpha + k \text{ctg } kT_2 + k \text{ctg } kT_1 \geq 0, \\ |\lambda_i^+| < 1, i = 1, 2. \end{cases}$$

При $X_1^+ = X_2^-$ допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k(\operatorname{ctg} kT_2 + \operatorname{ctg} kT_1)^2 + 2\alpha(\operatorname{ctg} kT_2 - \operatorname{ctg} kT_1) = -4k, \\ \alpha - \sqrt{-\alpha k \operatorname{ctg} kT_2 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \geq 0, \\ -\alpha + k \operatorname{ctg} kT_2 + k \operatorname{ctg} kT_1 \leq 0, \\ |\lambda_1^+| < 1, |\lambda_2^-| < 1. \end{cases}$$

При $X_1^- = X_2^-$ допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k(\operatorname{ctg} kT_2 + \operatorname{ctg} kT_1)^2 + 2\alpha(\operatorname{ctg} kT_2 - \operatorname{ctg} kT_1) = -4k, \\ -\alpha + \sqrt{-\alpha k \operatorname{ctg} kT_2 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \geq 0, \\ -\alpha + k \operatorname{ctg} kT_2 + k \operatorname{ctg} kT_1 \leq 0, \\ |\lambda_i^+| < 1, i = 1, 2. \end{cases}$$

При $X_1^- = X_2^+$ допустимая область определяется из системы

$$\begin{cases} k(\operatorname{ctg} kT_2 + \operatorname{ctg} kT_1)^2 + 2\alpha(\operatorname{ctg} kT_2 - \operatorname{ctg} kT_1) = -4k, \\ \alpha + \sqrt{-\alpha k \operatorname{ctg} kT_2 + \frac{\alpha^2}{4} - k^2} \leq 0, \\ -\alpha + k \operatorname{ctg} kT_2 + k \operatorname{ctg} kT_1 \geq 0, \\ |\lambda_1^-| < 1, |\lambda_2^+| < 1. \end{cases}$$

Пусть периоды полукристаллов задаются (9). Тогда (11) преобразуется к виду

$$\sin^2 2kT + 4 \frac{\alpha}{k} \varepsilon (\sin^2 kT - k^2 \varepsilon^2 \cos^2 kT) + 4 (\sin^2 kT - k^2 \varepsilon^2 \cos^2 kT)^2 = 0.$$

Зависимость волнового числа от разности периодов решеток изображена на рис. 2, а. Допустимые значения волнового числа изображены на рис. 2, б, в. При $\varepsilon \rightarrow 0$ мы приближаемся к модели истинного кристалла. На рис. 2, в, видно, что при этом связанных состояний нет, что верно.

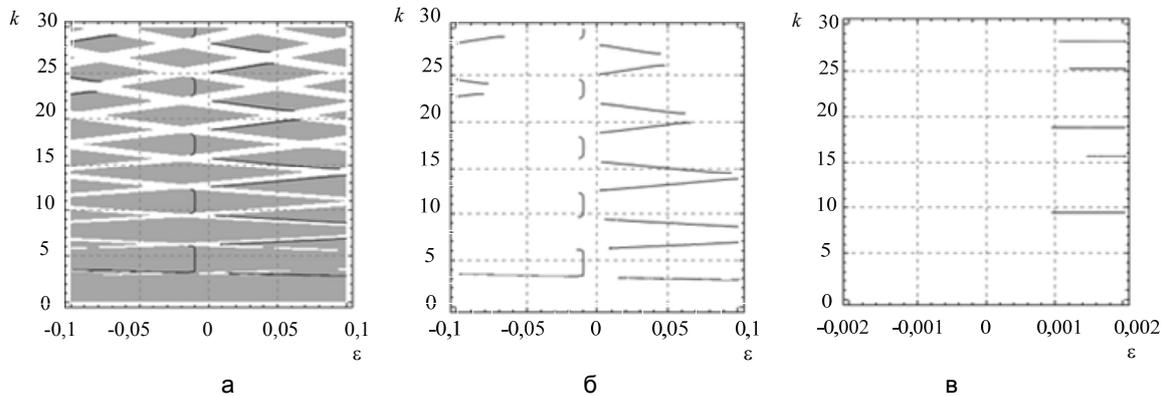


Рис. 2. Допустимая область (обозначена серым цветом) на плоскости параметров системы (а); зависимость волнового числа от разности периодов решеток (серым цветом обозначены допустимые области, черным цветом – значения волнового числа) (б); допустимые значения волнового числа (в)

Заключение

Рассмотренная модель описывает спектральные свойства двух соединенных полукристаллов при потенциале Кронига–Пенни. При нахождении точек дискретного спектра оператора (3) использовались матрицы монодромии для левого и правого полукристаллов. Предложен метод расчета точечного спектра для системы соединенных полубесконечных кристаллов. В работе был найден точечный спектр оператора Шредингера для двух соединенных полукристаллов с различными периодами при двух способах соединения, проанализирована зависимость спектра от параметров системы, проверено соответствие с полученными ранее результатами.

Модель может быть применена для исследования электронного транспорта через переход между полупроводниками с различными решетками.

Работа поддержана программой «Развитие потенциала высшей школы России» (2.1.1/4215) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

Литература

1. Kronig R. de L. Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices / R. de L. Kronig, W.G. Penney. – Proc. Roy. Soc. (London). – 1931. – V. 130A.
2. Альбеверио С. Решаемые модели в квантовой механике / С. Альбеверио, Ф. Гестези, Р. Хеэг-Крон, Х. Хольден: Пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 568 с.
3. Kurasov P. Spectral Asymptotics for Schrodinger Operators with Periodic Point Interactions / P. Kurasov, J. Larsen // J. Math. Anal. Appl. – 2002. – Вып. 266. – С. 127–148.
4. Korotyaev E. Schrodinger Operator With Periodic Plus Compactly Supported Potentials on the Half-line <http://arxiv.org/> [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://arxiv.org/abs/0710.2832v2>, свободный. – Яз. англ. (дата обращения 29.06.2010).
5. Korotyaev E. Schrodinger Operator With Periodic Plus Compactly Supported Potentials <http://arxiv.org/> [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://arxiv.org/abs/0904.2871v1>, свободный. – Яз. англ. (дата обращения 29.06.2010).
6. Korotyaev E. Lattice Dislocations in a 1-Dimensional Model // Commun. Math. Phys. – 2000. – V. 213. – P. 471–489.
7. Gesztesy F. Spectral properties of a class of reactionless Schrodinger Operators / F. Gesztesy, P. Yuditskii // J. Funct. Anal. – 2006. – V. 241. – P. 486–527.
8. Maioli M. Absence of the absolutely continuous spectrum for Stark-Bloch operators with strongly singular periodic potentials / M. Maioli, A. Sacchetti // J. Phys. – 1998. – V. 31(3).
9. Niikuni H. Absent Spectral Gaps of the Generalized Kronig-Penney Hamiltonians // Kyushi. J. Math. – 2008. – V. 62. – P. 89–105.
10. Пожарский А. Полукристалл с сингулярным потенциалом в ускоряющем электрическом поле // Теор. и мат. физ. – 2006. – Вып. 146(3). – С. 343–360.
11. Bronski J.C. Dislocation Defects and Diophantine Approximation / J.C. Bronski, Z. Rapti// <http://arxiv.org/> [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://arxiv.org/abs/0904.2582v1>, свободный. – Яз. англ. (дата обращения 29.06.2010).

Скорынина Анастасия Наилевна – Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, студентка, anastasia2705@yandex.ru