

SU800395



ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԻՆՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЕФ И-359(17)-79

Э.А.БАБАХАНЯН, Ю.В.КОНОНЕЦ

СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН
И БЛОХОВСКИЕ ФУНКЦИИ ЧАСТИЦЫ В МОДЕЛИ
ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ С ПОТЕНЦИАЛОМ
КРОНИГА-ПЕННИ

ԱՐՄՍ

ԵՐԵՎԱՆ



ԵՐԵՎԱՆ

1979

Э.А.БАБАХАНЯН, Ю.В.КОНОНЕЦ х)

СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН И БЛОХОВСКИЕ ФУНКЦИИ
ЧАСТИЦЫ В МОДЕЛИ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ С
ПОТЕНЦИАЛОМ КРОНИГА-ПЕННИ

Рассмотрен движение заряженной частицы в одномерном периодическом потенциале типа Кронига-Пенни. Подробно исследованы свойства энергетической зонной структуры и блоховских волновых функций в координатном и импульсном представлениях. Выделены две группы резко различающихся состояний - подбарьерные и надбарьерные, и указана роль каждой из них в явлении каналирования положительно и отрицательно заряженных частиц. Показано, что информация о свойствах симметрии блоховских функций на краях энергетических зон может быть извлечена непосредственно из дисперсионного уравнения; дана оценка размеров соответствующих областей краевой когерентности в зоне Бриллюэна. В надбарьерной области обнаружено нетривиальное явление нарушения чередования четности волновых функций на границах энергетических зон, связанное с занулением коэффициента отражения от изолированного барьера или ямы, и выявлено осцилляционное поведение ширины разрешенных и запрещенных энергетических полос. Аналитические выводы проиллюстрированы численными расчетами при различных значениях параметров задачи.

Ереванский физический институт
Ереван 1979

х) Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова

E.A.DABAKHANYAN, Yu.V.KONONETS*

THE ENERGY BANDS STRUCTURE AND BLOCH FUNCTIONS IN THE PLANAR
CHANNELING MODEL WITH THE KRÖNIG-PENNEY POTENTIAL

The motion of the charged particle in a one-dimensional periodic potential of the Krönig-Penney type is considered. The energy band structure, Bloch wave functions (BWF) in coordinate and momentum representation are investigated in detail. Two sharply distinguished groups of states, i.e. below-the-barrier and above-the-barrier, are extracted, and the role of both positively and negatively charged particles in the channeling is explained. It is shown that only with use of a dispersion equation form one can obtain the information on the symmetry properties of the BWF at the edges of energy bands. The estimate of the corresponding regions of the edge coherence in the Brillouin zone is given. In above-the-barrier case the nontrivial effect of parity interchange violation of BWF at the edges of energy bands, connected with the nullification of the reflection coefficient either from the single barrier or well is found. Oscillation behaviour of both allowed and forbidden band widths is revealed. The analytical results for different values of the parameters are illustrated by computer calculations.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1979

* - I.V.Kurchatov Institute of Atomic Energy

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЕФИ-359(17)-79

Э.А.БАБАХАНИЯ, Ю.В.КОНОНЕЦ х)

СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН И БЛОКОВСКИЕ ФУНКЦИИ
ЧАСТИЦЫ В МОДЕЛИ ПЛОСКОСТНОГО КАНАЛИРОВАНИЯ С
ПОТЕНЦИАЛОМ КРОНИГА-ПЕННИ

х) Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова

Ереван 1979

© *Ереванский физический институт, 1979*

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы задача о движении частицы в одномерном периодическом потенциале приобрела новое значение в связи с квантовой теорией каналирования быстрых заряженных частиц в кристаллах. Именно, в случае плоскостного каналирования поперечное движение частиц описывается уравнением Шредингера с некоторым эффективным одномерным периодическим потенциалом (см., например, [1, 2]). Как следствие, волновая функция каналирующейся частицы представляет собой суперпозицию соответствующих блоховских функций, свойства которых и определяют, фактически, весь спектр физических явлений, наблюдающихся в условиях каналирования.

В простейших случаях эффективным периодическим потенциал представляет собой совокупность довольно широких потенциальных барьеров одинаковой высоты, и состояния частицы в таком потенциале естественным образом разбиваются на две группы.

Одну из них составляют состояния, энергия которых меньше высоты потенциального барьера. Эти, так называемые подбарьерные состояния, обычно допускают простое рассмотрение, например, в рамках приближения сильной связи, и их роль в явлении каналирования к настоящему времени изучена сравнительно хорошо [3].

Группа же надбарьерных состояний, энергия которых лежит выше высоты потенциального барьера, уже не допускает столь простого рассмотрения, и их роль в явлении каналирования, особен-

но для случая отрицательно заряженных частиц, до сих пор в значительной степени оставалась нераскрытой. Между тем, как будет видно из дальнейшего, именно эти состояния несут ответственность за аномально глубокое проникновение электронов в кристалл в условиях каналирования.

Вероятность заселения того или иного состояния в эффективном периодическом потенциале зависит от угла падения пучка частиц на кристалл, причем максимальной заселенности каждого состояния отвечает определенный угол падения. Поэтому квантовомеханическое описание явления каналирования в широком диапазоне углов требует знания блоховских состояний для достаточно большого количества (в некоторых случаях - для нескольких сотен) энергетических зон одновременно.

С точки зрения простоты и возможности проведения полного анализа наиболее приемлемой на современном этапе является модель периодического потенциала, составленного из прямоугольных потенциальных барьеров конечной ширины и высоты. Такой потенциал, известный как потенциал Кронига-Пенни, позволяет, в частности, проанализировать различия в картинах каналирования положительно и отрицательно заряженных частиц.

Хотя квантовомеханическая задача о движении частиц в потенциале типа Кронига-Пенни формально решена довольно давно [4, 5], некоторые важные вопросы в этой задаче еще не были выяснены до конца. По этой причине, в частности, и проблема каналирования в таком потенциале при возросшем в последнее время интересе к ней [3] осталась, фактически, не исследованной, если не считать иллюстративных расчетов, проведенных в работе [1].

В настоящей статье, работая в рамках модели Кронига-Пенни, мы ставим себе следующие задачи:

1. Изучение особенностей структуры подбарьерных и надбарьерных энергетических зон в зависимости от ширины и высоты потенциального барьера. Этот вопрос интересен прежде всего потому, что высота реального эффективного потенциала, выраженная в безразмерных единицах, оказывается пропорциональной релятивистской массе частицы со всеми вытекающими отсюда последствиями.

2. Исследование свойств волновых функций в зависимости от номера зоны n и квазиимпульса q .

3. Изучение распределения частиц по импульсам в различных блоховских состояниях.

Среди этого круга вопросов важное место занимает вопрос о поведении блоховских волновых функций (как в координатном, так и в импульсном представлении) в центре и на границах зоны Бриллюэна.

Сильнейшие когерентные эффекты, обусловленные периодичностью потенциала, находят свое отражение в свойствах симметрии волновых функций таких состояний и приводят к определенным строгим соотношениям между коэффициентами в выражениях для этих функций, что особенно важно при численных расчетах.

Как следствие, импульсное распределение частиц в таких состояниях, независимо от того, подбарьерные они или надбарьерные, характеризуются тем, что в нем в равной степени представлены противоположно направленные импульсы.

Это означает, что при некоторых строго определенных углах

падения, больших угла каналирования, в угловом распределении частиц за кристаллом должна наблюдаться картина "зеркального" отражения частиц от рассматриваемых кристаллографических плоскостей.

Ниже будет дана оценка ширины области значений квазимпульса вблизи границ энергетических зон надбарьерных состояний, где должны иметь место отмеченные когерентные эффекты.

Имея в виду дальнейшие приложения, мы рассматриваем при численных расчетах одновременно два потенциала типа Кронига-Пенни, отличающихся друг от друга знаком.

Результаты сравнительного анализа явлений плоскостного каналирования положительно и отрицательно заряженных частиц различной энергии в модели Кронига-Пенни мы предполагаем опубликовать в ближайшем будущем.

2. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ.

Мы не будем останавливаться на выводе дисперсионного уравнения, определяющего энергетический спектр частицы, движущейся в периодическом потенциале типа Кронига-Пенни. Этот вывод хорошо известен (см., например, [5]).

Одна из целей настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что информация о свойствах блоховских волновых функций и, в частности, об их поведении на границах энергетических зон заключена в дисперсионном уравнении в достаточно простом виде, и может быть легко извлечена из него.

Энергию частицы с массой m , движущейся в потенциале Кронига-Пенни периода d , будем записывать в виде

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2md^2}. \quad (1)$$

Пусть далее a определяет ширину потенциальной ямы в единицах d , а безразмерная постоянная k_0 отвечает высоте потенциального барьера V_0 :

$$k_0 = \frac{d}{\hbar} (2mV_0)^{1/2} \quad (2)$$

Введем четыре функции $\mathcal{P}(k)$, $\mathcal{Q}(k)$, $\mathcal{R}(k)$ и $\mathcal{J}(k)$

следующим образом

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(k) &= \cos \frac{\beta \alpha(k)}{2} \cos \frac{ka}{2} - \frac{k}{\alpha} \sin \frac{\beta \alpha(k)}{2} \sin \frac{ka}{2}, \\ \mathcal{Q}(k) &= \cos \frac{\beta \alpha(k)}{2} \sin \frac{ka}{2} + \frac{k}{\alpha} \sin \frac{\beta \alpha(k)}{2} \cos \frac{ka}{2}, \\ \mathcal{R}(k) &= \cos \frac{\beta \alpha(k)}{2} \sin \frac{ka}{2} + \frac{\alpha}{k} \sin \frac{\beta \alpha(k)}{2} \cos \frac{ka}{2}, \\ \mathcal{J}(k) &= \cos \frac{\beta \alpha(k)}{2} \cos \frac{ka}{2} - \frac{\alpha}{k} \sin \frac{\beta \alpha(k)}{2} \sin \frac{ka}{2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\beta = 1 - a$ - ширина барьера, а

$$\alpha(k) = \sqrt{k^2 - k_0^2}. \quad (4)$$

Выражениями (3) будем пользоваться во всей области значений $0 \leq k < \infty$; надо только помнить, что в подбарьерной области, где $k < k_0$, в этих формулах происходит переход тригонометрических функций $\cos \frac{\beta \alpha(k)}{2}$ и $\sin \frac{\beta \alpha(k)}{2}$ в гиперболические по обычной схеме

$$\cos \frac{\beta \alpha(k)}{2} \rightarrow \operatorname{ch} \frac{\beta |\alpha(k)|}{2}, \quad \frac{\sin \frac{\beta \alpha(k)}{2}}{\alpha(k)} \rightarrow \frac{\operatorname{sh} \frac{\beta |\alpha(k)|}{2}}{|\alpha(k)|}.$$

Квазимпульс q , характеризующий блоховские состояния и лежащий в первой элементарной ячейке обратной одномерной решетки, будем измерять в единицах π/d , так что $-1 \leq q \leq 1$. Тогда дисперсионное уравнение, решение которого $k_n(q)$ определяет уровни энергии (1), может быть представлено в двух формах:

$$Q(k) + R(k) = \sin^2 \pi q / 2 \quad (5)$$

$$P(k) + S(k) = \cos^2 \pi q / 2. \quad (6)$$

Такая возможность становится очевидной, если воспользоваться тождеством

$$Q(k) + R(k) + P(k) + S(k) = 1, \quad (7)$$

в справедливости которого легко убедиться непосредственно.

Из (5) и (6) следует, что в соответствии с требованием общей теории [6] имеет место симметрия закона дисперсии

$$\varepsilon_n(-q) = \varepsilon_n(q).$$

Уравнение (5) чрезвычайно удобно при анализе задачи в области малых q , а уравнение (6) в области $|q|$, близких к 1.

Дело в том, что введенные нами величины $P(k)$, $Q(k)$, $R(k)$ и $S(k)$ непосредственно фигурируют в выражениях для волновых функций (см. ниже формулы (9), (10)). Информация же о поведении этих величин может быть получена прямо на уровне дисперсионных уравнений (5) и (6), позволяя сделать важные заключения о свойствах волновых функций в центре и на границах зоны Бриллюэна. При этом очень существенным для дальнейшего анализа оказывается то обстоятельство, что величины $P(k)$, $Q(k)$, $R(k)$ и $S(k)$ входят в выражения для блоховских волновых функций в виде определенных комбинаций с $\sin \pi q / 2$ и $\cos \pi q / 2$. Эти комбинации обозначим через

$$P = \frac{\cos \pi q / 2}{P(k_n(q))}, \quad Q = \frac{\sin \pi q / 2}{Q(k_n(q))}, \quad R = \frac{\sin \pi q / 2}{R(k_n(q))}, \quad S = \frac{\cos \pi q / 2}{S(k_n(q))}. \quad (8)$$

3. СВОЙСТВА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В СЕРЕДИНЕ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА.

3.1. ЯВНЫЙ ВИД ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В ОТСУТСТВИЕ ВЫРОЖДЕНИЯ.

Рассмотрим область малых значений $|q| \leq \frac{1}{2}$. Из (5) следует, что при $q \rightarrow 0$ одна из величин $Q(k_n(q))$ или $R(k_n(q))$ должна обратиться в нуль. Ситуация со случайным вырождением, когда при $q \rightarrow 0$ зануляются одновременно обе функции Q и R , будет рассмотрена отдельно в разделе 3.4.

Легко видеть, что в отсутствие случайного вырождения величины Q и R ведут себя при $q \rightarrow 0$ таким образом, что одна из них обязательно обращается в нуль, а модуль другой стремится к ∞ . Так если $R(k_n(0)) = 0$, то $\lim_{q \rightarrow 0} |R| = \infty$, а $Q = 0$. (Значение функций при $q = 0$ для удобства записи обозначим индексом 0). В другом случае, когда $Q(k_n(0)) = 0$, будем иметь $R = 0$ и $\lim_{q \rightarrow 0} |Q| = \infty$. Важно отметить, что при этом в обеих ситуациях $|P|$ и $|S|$ принимают конечные значения, как это следует из (3), (6), и (8).

Используя эти свойства, нетрудно установить вид блоховских волновых функций $\psi_{nq}(x)$ при малых q .

Рассмотрим явные выражения для $\psi_{nq}(x)$, отсчитывая x в единицах d от центра потенциальной ямы.

I. Пусть $\lim_{q \rightarrow 0} R(k_n(q)) = 0$. Тогда при малых q

$$\psi_{nq}(x) = \begin{cases} C_{nq}^{(0)} (\cos k_n x + i QS \sin k_n x), & |x| \leq \frac{a}{2} \\ C_{nq}^{(0)} e^{i \frac{\pi q}{2}} [S \cos \alpha_n (x - \frac{1}{2}) + i \frac{k_n}{\alpha_n} Q \sin \alpha_n (x - \frac{1}{2})], & \frac{a}{2} \leq x \leq 1 - \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (9)$$

$C_{nq}^{(0)}$ - нормировочная постоянная, равна

$$C_{nq}^{(1)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \left[1 + \frac{\sin k_n a}{k_n a} + Q^2 S^2 \left(1 - \frac{\sin k_n a}{k_n a} \right) + \frac{b}{a} \left[\frac{k_n^2}{\alpha_n^2} Q^2 \left(1 - \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) + S^2 \left(1 + \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) \right] \right]^{-1/2}$$

2. Пусть теперь $\lim_{q \rightarrow 0} Q(k_n(q)) = 0$. В этом случае удобно записать волновые функции в виде

$$\psi_{nq}(x) = \begin{cases} C_{nq}^{(2)} (P R \cos k_n x + i \sin k_n x), & |x| \leq \frac{a}{2} \\ C_{nq}^{(2)} e^{i\pi x/2} \left[R \cos \alpha_n (x - \frac{1}{2}) + i \frac{k_n}{\alpha_n} P \sin \alpha_n (x - \frac{1}{2}) \right], & \frac{a}{2} \leq x \leq 1 - \frac{a}{2} \end{cases} \quad (10)$$

$$C_{nq}^{(2)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \left[P^2 R^2 \left(1 + \frac{\sin k_n a}{k_n a} \right) + \left(1 - \frac{\sin k_n a}{k_n a} \right) + \frac{b}{a} \left[\frac{k_n^2}{\alpha_n^2} P^2 \left(1 - \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) + P^2 \left(1 + \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) \right] \right]^{-1/2}$$

Выражения (9), (10) определяют волновые функции в одной элементарной ячейке прямой решетки. Значения в других элементарных ячейках определяются условием Блоха

$$\psi_{nq}(x+l) = e^{i\pi q l} \psi_{nq}(x), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (11)$$

Следует отметить, что формулы (9) и (10) справедливы при любых значениях q и, как легко убедиться с помощью (5) и (6), являются эквивалентными. Однако, если пользоваться для $\psi_{nq}(x)$ выражением какого-либо одного вида, то при $q \rightarrow 0$ пришлось бы при необходимости раскрывать неопределенность типа $0/0$. Такая же ситуация имеет место и на границах зоны Бриллюэна $q = \pm 1$ (см. ниже раздел 4).

Полученные выражения наглядно демонстрируют свойства симметрии волновых функций при $q = 0$. Действительно, в первом случае ($R = 0, Q = 0$) ψ -функция является четной функцией как относительно точки $x = 0$, так и относительно точки $x = 1/2$, а во втором ($Q = 0, R = 0$) - нечетной.

Таким образом, информация о том, какая из функций Q или R обращается в нуль при $q = 0$, полученная на уровне дисперсионного уравнения, немедленно указывает на свойства симметрии соответствующих блоховских функций.

3.2. Нарушение чередования четности волновых функций.

Интересен вопрос о том, как меняются свойства четности волновых функций, отвечающих $q = 0$, при переходе от одной энергетической зоны к другой. Что касается подбарьерной области, то простой анализ расположения нулей функций $Q(k)$ и $R(k)$ показывает, что при $k < k_0$ они строго чередуются, т.е. между каждыми двумя нулями функции $R(k)$ лежит один нуль функции $Q(k)$. Это означает, что имеет место последовательное чередование четности блоховских функций подбарьерных состояний, отвечающих цен. ру зоны Бриллюэна (при этом волновая функция наинизшего состояния, как и должно быть, является четной, волновая функция второго по энергетической шкале состояния - нечетна и т.д.)

В надбарьерных состояниях картина чередования четности волновых функций претерпевает существенные изменения. Действительно, положения нулей функций $Q(k)$ и $R(k)$ определяются, соответственно, следующими уравнениями

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha b}{2} = -\frac{\alpha}{k} \operatorname{tg} \frac{ka}{2} \quad (12)$$

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha b}{2} = -\frac{k}{\alpha} \operatorname{tg} \frac{ka}{2} \quad (13)$$

Простое графическое исследование относительно положения корней этих уравнений показывает, что в надбарьерной области

всегда может осуществляться ситуация, когда между двумя корнями первого уравнения лежат два корня второго или наоборот и, следовательно, происходит нарушение последовательного чередования четности волновых функций соответствующих состояний. В частности, подбором параметров потенциала можно добиться того, что в некоторой области значений энергии будет иметь место "попарное" чередование четности, т.е. за двумя симметричными состояниями будут следовать два антисимметричных и т.д.

Нетрудно увидеть, что имеется вполне однозначная связь между сдвигами в чередовании четности блоховских ψ -функций и занулением коэффициента отражения от отдельного звена потенциала Кронига-Пенни. Так, если в некоторой области изменения переменной k расстояние между нулями функции $\operatorname{tg} \frac{\alpha b}{2}$ больше, чем $2/\pi a$, то нарушение чередования четности волновых функций в этом случае будет происходить в окрестности тех значений k , для которых коэффициент r_e надбарьерного отражения от изолированного потенциального барьера [7]

$$r_e = \frac{k_0^4 \sin^2 \alpha b}{k_0^4 \sin^2 \alpha b + 4k^2 \alpha^2} \quad (14)$$

обращается в нуль. В обратном случае, когда интервал между нулями функции $\operatorname{tg} \frac{\alpha b}{2}$ меньше, чем $2/\pi a$, собой будет возникать вблизи тех k , которым отвечает обращение в нуль коэффициента

$$r_w = \frac{k_0^4 \sin^2 ka}{k_0^4 \sin^2 ka + 4k^2 \alpha^2} \quad (15)$$

отражения от отдельной ямы потенциала Кронига-Пенни.

3.3. Размеры областей краевой когерентности.

Возникновение симметрии волновых функций при $q = 0$ можно интерпретировать как результат когерентного воздействия периодической среды. Это особенно ясно видно, если работать в импульсном представлении (см. Введение).

Нетрудно показать, что в пределе $k_n \rightarrow \infty$ при любом конечном q волновые функции (9), (10) представляют собой плоские волны типа $e^{\pm i k_n x}$, и только на краях энергетических зон когерентное влияние среды приводит к появлению симметричных или антисимметричных комбинаций таких волн. Об этом явлении мы будем говорить как о краевой когерентности.

Если теперь вернуться к конечным значениям k , то естественно возникает вопрос о ширине области квазиимпульсов Δq (вблизи $q = 0$), в которой можно ожидать проявления эффектов краевой когерентности. Это фактически вопрос о том, при каких отклонениях угла падения пучка от условий Брэгга соответствующие брэгговские отражения проявляются еще достаточно сильно.

Рассмотрим случай (9), когда $QS|_{q=0} = 0$. Величину Δq , очевидно, можно оценить из условия

$$|Q(k_n(\Delta q)) S(k_n(\Delta q))| \sim 1, \quad (16)$$

которое означает просто, что коэффициенты перед синусом и косинусом в яме сравнимы по величине (оценка из сравнения коэффициентов над барьером при $k_n \gg k_0$ дает, как легко убедиться, тот же результат). При этом важно иметь в виду, что при малых Δq отношение $\frac{\cos \pi \Delta q / 2}{J(k_n(\Delta q))}$, как функция Δq , для надбарьерных зон меняется слабо и имеет значение порядка 1. Отношение же $\frac{\sin \pi \Delta q / 2}{Q(k_n(\Delta q))}$ с ростом Δq меняется сильно и требует вни-

мательного рассмотрения.

Работая в одной энергетической зоне, для зависимостей $Q(k_n(\Delta q))$, $S(k_n(\Delta q))$ и т.д. будем писать просто $Q_n(\Delta q)$, $S_n(\Delta q)$ и т.д., и воспользовавшись (5), перепишем (I6) в виде

$$\left| \frac{R_n(\Delta q)}{\sin \pi \Delta q / 2} \cdot \frac{\cos \pi \Delta q / 2}{S_n(\Delta q)} \right| \sim 1. \quad (I7)$$

Ограничиваясь членами до 2^{го} порядка включительно и учитывая, что $R_n(0) = 0$, разложим теперь $R_n(\Delta q)$ в ряд по Δq

$$R_n(\Delta q) = R_n'(0) \cdot \Delta q + R_n''(0) \frac{(\Delta q)^2}{2}. \quad (I8)$$

Производные 1-го и 2-го порядка легко получить дифференцированием тождества (5) по q :

$$R_n'(0) = 0, \quad R_n''(0) = \pi^2 / 2 \cdot Q_n(0). \quad (I9)$$

Подставляя (I8) в (I7), с учетом (I9), будем иметь

$$\Delta q_n \approx \frac{2}{\pi} |Q_n(0) S_n(0)| \quad (20)$$

Таким образом, задача свелась к вычислению величин $Q_n(0)$ и $S_n(0)$. Что касается величины $Q_n(0)$, то условие $R_n(0) = 0$ немедленно приводит к точному результату

$$Q_n(0) = -\frac{k_0^2}{k_n^2 - k_0^2} \cos \frac{\delta}{2} \sqrt{k_n^2 - k_0^2} \sin \frac{k a}{2}. \quad (21)$$

С другой стороны величина $|S_n(0)|$ для высоколежащих надбарьерных состояний, как легко показать, равна единице с точностью до членов $\sim \frac{k_0^2}{k_n^2}$. Итак, ширина Δq_n области краевой когерентности в высоколежащей n -ой энергетической зоне осциллирует с ростом n , спадая по амплитуде как

$$\Delta q_n \approx \frac{1}{\pi} \left(\frac{k_0}{k_n} \right)^2 |\sin \delta \cos \frac{\delta}{2}| + O\left(\frac{k_0^4}{k_n^4} \right) \quad (22)$$

При записи (22) мы воспользовались тем обстоятельством, что

$$\cos \frac{b}{2} \sqrt{k_n^2 - k_0^2} \cdot \sin \frac{k_n a}{2} = \frac{1}{2} \sin b \sqrt{k_n^2 - k_0^2} + O\left(\frac{k_n^2}{k_0^2}\right).$$

В надбарьерной области по мере приближения k_n к k_0 сверху Δq_n эффективно возрастает до 1; в случае подбарьерных зон ($k_n < k_0$), где практически все волновые функции хорошо описываются приближением сильной связи, учет конечности q приводит лишь к экспоненциально малым добавкам к симметричным и антисимметричным выражениям для волновых функций, давая в результате $\Delta q_n = 1$.

В случае (10) аналогичное рассмотрение приводит в далекой надбарьерной области к результату

$$\Delta q_n = \frac{2}{\pi} |R_n(0) P_n(0)|. \quad (23)$$

Здесь $|P_n(0)| \sim 1$, а $R_n(0) = \frac{k_0^2}{k_n^2} \cos \frac{b}{2} \sqrt{k_n^2 - k_0^2} \cdot \sin \frac{k_n a}{2}$ и, следовательно, мы снова приходим к формуле (22) для Δq_n .

Итак, можно сказать, что в подбарьерной или низколежащей надбарьерной зоне когерентные эффекты в полной мере проявляются во всей энергетической зоне, а не только на ее краях.

3.4. Волновые функции в вырожденном случае.

Рассмотрим теперь вопрос о выборе волновых функций вблизи середины зоны Бриллюэна, когда $\lim_{q \rightarrow 0} R(k_n(q)) = \lim_{q \rightarrow 0} Q(k_n(q)) = 0$. Этот вырожденный случай имеет место, если при $k = k_n(0)$ зануляются

одновременно как коэффициент отражения r_c (14) от изолированного барьера, так и коэффициент отражения r_w (15) от отдельной ямы потенциала Кронига-Пенни, и отвечает ситуации, когда верхний край некоторой надбарьерной энергетической зоны касается "дна" лежащей над ней соседней зоны.

Для определения вида волновых функций в вырожденном случае

в центре зоны Бриллюэна разложим дисперсионное уравнение (5) вблизи $q = 0$. Индекс нуль, как и прежде, будет означать, что функции берутся при $q = 0$.

$$Q_0 = Q_0' \left(\frac{\partial k}{\partial q} \right)_0 q \quad \text{и аналогично для } R.$$

$$\text{Тогда дисперсионное уравнение дает } Q_0' R_0' \left(\frac{\partial k}{\partial q} \right)_0^2 = \frac{\pi^2}{4}.$$

Надо рассмотреть два случая: 1) когда $\sin ka/2 = 0$ и $\sin \frac{ka}{2} = 0$
и 2) $\cos \frac{ka}{2} = 0$, $\cos \frac{ka}{2} = 0$.

Вычислив Q_0' , R_0' , нормировочные коэффициенты C_n , имеем

$$Q_0' = \frac{1}{2} \frac{k^2 - ak_0^2}{x^2}; \quad R_0' = \frac{1}{2}; \quad \left(\frac{\partial k}{\partial q} \right)_0 = \pm \pi \frac{x}{\sqrt{k^2 - ak_0^2}}.$$

Волновые функции принимают вид

$$\psi_n = \begin{cases} \cos kx \pm i \frac{x}{\sqrt{k^2 - ak_0^2}} \sin kx \\ \cos x(x - 1/2) \pm i \frac{k}{\sqrt{k^2 - ak_0^2}} \sin x(x - 1/2). \end{cases} \quad (24)$$

Во 2-ом случае аналогичные вычисления приводят к формулам типа (24) с формальной заменой косинуса на синус и наоборот.

Интересно, что при $k \gg k_0$ эти функции переходят в плоские волны e^{ikx} и e^{-ikx} .

Итак, в вырожденном случае необходимо вычислять волновые функции с помощью предельного перехода при $q \rightarrow 0$, что создает дополнительные трудности при численных расчетах.

Наложение малого возмущения привело бы к появлению малой щели между рассматриваемыми зонами и к снятию вырождения, причем волновые функции при $q = 0$ в одной зоне описывались бы действительной частью выражения (9), а в другой — его мнимой частью. Это означает, что и в вырожденном случае действительная и мнимая части (9) и (10) по отдельности являются искомыми ортогональными блоховскими решениями, в чем легко убедиться не-

посредственно. Итак, два решения $\psi_n(x)$ и $\psi_{n+1}(x)$ в вырожденном случае могут быть выбраны в виде

$$\psi_n(x) = \sqrt{2} \cdot \begin{cases} \cos kx \\ \cos \alpha(x-1/2) \end{cases}, \quad \psi_{n+1}(x) = \sqrt{2} \cdot \begin{cases} \sin kx \\ \sin \alpha(x-1/2) \end{cases}. \quad (25)$$

($q_y = 0$, поэтому для упрощения записи индекс q в приведенных формулах опущен).

Отметим, что в случае подбарьерных энергетических зон ситуация с вырождением исключена.

4. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ВБЛИЗИ КРАЕВ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА.

Анализ свойств блоховских волновых функций вблизи краев зоны Бриллюэна $q = \pm \Gamma$ проводится аналогично и дает следующие результаты.

В отсутствие случайного вырождения, когда только одна из величин $\mathcal{P}(k_n(q))$ и $\mathcal{S}(k_n(q))$ обращается в нуль при $|q| \rightarrow \Gamma$, явный вид волновой функции дается формулой (9), если $\lim_{|q| \rightarrow \Gamma} \mathcal{P}(k_n(q)) = 0$, и формулой (10), если $\lim_{|q| \rightarrow \Gamma} \mathcal{S}(k_n(q)) = 0$. Как следствие, волновая функция, отвечающая $|q| = \Gamma$, в первом случае четна относительно $x = 0$ и нечетна относительно $x = 1/2$. Во втором случае, наоборот, ψ -функция с $|q| = \Gamma$ является нечетной относительно $x = 0$ и четной относительно $x = 1/2$.

Так же, как и в центре зоны Бриллюэна, нарушение чередования четности волновых функций с $|q| = \Gamma$, будет происходить вблизи тех значений k , которым отвечает обращение в нуль коэффициента отражения либо от изолированного потенциального барьера, либо от изолированной ямы потенциала Кронига-Пенни (см. подробнее раздел 3.2).

Размеры областей краевой когерентности около границ зоны Бриллюэна, так же как и вблизи $q = 0$, при $k_n \gg k_0$ определяются соотношением (22).

При наличии вырождения, которое может иметь место только в случае надбарьерных энергетических зон и характеризуется тем, что при $|q| = 1$ $\mathcal{P}(k_n(q)) = \mathcal{S}(k_n(q)) = 0$, две блоховские волновые функции, могут быть выбраны в виде

$$\psi_n(x) = \sqrt{2} \cdot \begin{cases} \cos kx \\ -\sin \alpha(x - \frac{1}{2}) \cdot \text{sign } q \end{cases}, \quad \psi_{n+1}(x) = \begin{cases} \sin kx \\ \cos \alpha(x - \frac{1}{2}) \cdot \text{sign } q \end{cases} \quad (26)$$

5. НЕКОТОРЫЕ ОБЩИЕ СВОЙСТВА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ И БЛОХОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ.

5.1. Об оценке ширины энергетической зоны.

При исследовании свойств зонной структуры большое значение имеет знание производной от энергии по квазиимпульсу в данной энергетической зоне. Для ее вычисления воспользуемся точным результатом (см., например, [8]), согласно которому производная $\frac{d\varepsilon_n(q)}{dq}$ определяется средним значением скорости в состоянии с волновой функцией $\psi_{nq}(x)$ и в наших единицах имеет вид

$$\frac{d}{dx} \frac{d\varepsilon_n(q)}{dq} = \frac{\hbar^2}{imd} \int_0^1 \psi_{nq}^* \frac{d\psi_{nq}}{dx} dx. \quad (27)$$

В зависимости от того, какая ситуация реализуется около интересующей нас границы энергетической зоны (см. выше разделы 3 и 4), при вычислении интеграла в (27) следует пользоваться выражением (9) или (10) для $\psi_{nq}(x)$. В результате приходим к соот-

шению

$$\frac{dk_n(q)}{dq} = T_n(q), \quad (28)$$

правая часть которого может быть записана в двух эквивалентных формах

$$T_n(q) = \frac{2\pi QS}{a \left[1 + \frac{\sin k_n a}{k_n a} + Q^2 S^2 \left(1 - \frac{\sin k_n a}{k_n a} \right) \right] + b \left[\frac{k_n^2 Q^2}{\alpha_n^2} \left(1 - \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) + S^2 \left(1 + \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) \right]} \quad (29)$$

$$T_n(q) = \frac{2\pi PR}{a \left[1 - \frac{\sin k_n a}{k_n a} + P^2 R^2 \left(1 + \frac{\sin k_n a}{k_n a} \right) \right] + b \left[\frac{k_n^2 P^2}{\alpha_n^2} \left(1 - \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) + R^2 \left(1 + \frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b} \right) \right]}$$

Для упрощения записи правой части (29) мы не указали в явном виде зависимости величин $k_n, \alpha_n, Q, S, P, R$ от q .

Полученное соотношение показывает, что производная $\frac{dk_n(q)}{dq}$, как и должно быть, обращается в нуль только в точках $q = 0$ и $q = \pm I$ (т.к. в этих точках соответственно одна из величин P, Q, R, S зануляется), являясь во всех точках зоны Бриллюэна непрерывной и конечной величиной. Последнее обстоятельство означает, в частности, что зависимость энергии от квазиимпульса $\xi_n(q)$ в данной энергетической зоне является однозначной и непрерывной функцией от q .

Из (28) вытекает весьма полезная для оценок интегральная формула ширины Δ_n n -ой энергетической зоны.

$$\Delta_n = \int_0^I T_n(q) dq \quad (30)$$

5.2. Подбарьерная область.

Количество уровней и зон внутри потенциальной ямы зависит от конкретных значений ее параметров - ширины, высоты и, как отмечалось раньше, от массы частицы.

С ростом величины k_0 от нуля до некоторого значения происходит процесс последовательного опускания надбарьерных энерги-

ческих зон и пересечения ими верха ямы с происходящим затем, так называемым, "затягиванием" зон ямой.

Критические значения k_c , при которых "потолок" l -ой зоны опускается в яму, определяется из уравнений, полученных на основе дисперсионных уравнений:

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \frac{k_c a}{2} - \frac{k_c l}{2} &= 0 \quad \text{для нечетных зон, т.е. } l=2n-1 \\ \operatorname{tg} \frac{k_c a}{2} + \frac{k_c l}{2} &= 0 \quad \text{для четных, } l=2n, \end{aligned} \quad (31)$$

где $n = 1, 2, \dots$, а решения k_c ищутся в интервале $(l-1)\frac{\pi}{a} < k_c a < l\pi$

Касание же n -ой зоны происходит при $k_n = \frac{\pi}{a}(n-1)$. Отсюда, кстати, видно, что аналогично одномерной изолированной неглубокой яме, в которой всегда есть один уровень энергии, и здесь имеется зона разрешенных энергий, сколь малым бы ни было значение k_0 .

Итак, если для конкретного значения k_0 выполняется неравенство $k_c < k_0 < \frac{l\pi}{a}$, то в яме находятся l зон, а первая надбарьерная расположена на некотором расстоянии от вершины ямы. При условии $(l-1)\frac{\pi}{a} < k_0 < k_c$ $(l-1)$ зона целиком находится внутри ямы, а часть l -ой лежит в яме, другая часть выступает над ней.

Структуру энергетических зон в подбарьерной области $k_n < k_0$ легко выявить путем перехода к пределу сильной связи, как это сделано, например, в [5], и получить, что расстояние между ближайшими подбарьерными зонами оказывается порядка π/a , т.е.

$$k_{n+1}(q) - k_n(q) \approx \pi/a. \quad (32)$$

Ширина же низколежащей подбарьерной зоны, как это следует из (32) с учетом экспоненциальной малости величин P, Q, R, S , определяется экспоненциально малым коэффициентом прохождения

через отдельный потенциальный барьер.

Что касается блововских волновых функций, то в рассматриваемом случае они с экспоненциальной точностью описываются пределом сильной связи и, следовательно, их свойства полностью определяются свойствами волновых функций изолированной потенциальной ямы потенциала Кронига-Пенни. Существенные отличия возникают лишь в случае высоколежащих энергетических зон, которым отвечают близкие к единице коэффициенты прохождения отдельного потенциального барьера.

5.3. "Близкая" надбарьерная область.

Рассматривая надбарьерную область, нетрудно видеть, что начиная со второй зоны, величинами $\sin \alpha_n b / \alpha_n b$, а тем более и $\sin k_n a / k_n a$ в знаменателе (29) можно пренебречь, в результате чего $T_n(q)$ приобретает более компактный вид

$$T_n(q) \approx \frac{2\pi QS}{a(1+Q^2S^2) + b\left(\frac{k_n^2}{\alpha_n^2} Q^2 + S^2\right)} \quad (33)$$

С помощью дисперсионных уравнений (5), (6) и явного вида функций P, Q, R, S (см. (3)-(8)) нетрудно убедиться, что в разрешенных энергетических зонах значения величин Q и S лежат в следующих интервалах

$$\frac{\alpha}{k} \sin \frac{\pi q}{2} \approx |Q_{\min}| \leq |Q| \leq |Q_{\max}| \approx 1 / \sin \frac{\pi q}{2} \quad (34)$$

$$\cos \frac{\pi q}{2} \approx |S_{\min}| \leq |S| \leq |S_{\max}| \approx \frac{k}{\alpha \cos \frac{\pi q}{2}}$$

Если обе величины $|Q|$ и $|S|$ расположены вблизи своих минимальных или максимальных значений, то

$$|T_n(q)| \sim \pi \frac{x}{k} \sin \pi q. \quad (35)$$

Если же одна из величин $|Q|$ и $|S|$ находится вблизи своего максимального, а другая - вблизи минимального значения, то

$$|T_n(q)| \sim \pi \frac{x^2}{k^2} \sin \pi q / [b + (a + \frac{b}{4} \sin^2 \pi q) \frac{x^2}{k^2}]. \quad (36)$$

С другой стороны, важно иметь в виду, что максимальное значение $|T_n(q)|_{\max}$ в надбарьерной области, как это следует из (33),

$$|T_n(q)|_{\max} \leq \pi / (a + b \frac{k}{x}). \quad (37)$$

Соотношения (35)-(37) показывают, что при достаточно больших значениях k_0 -высоты потенциального барьера, ширины Δ_n низколежащих надбарьерных зон оказываются малыми. При этом типично, по-видимому, является ситуация, когда

$$|\Delta_n| \sim \frac{x_n}{k_n}. \quad (38)$$

Однако в специальных случаях, в зависимости от параметров потенциала Кронига-Пенни, а также от положения рассматриваемой энергетической зоны, возможно существование экстремально узких надбарьерных зон шириной

$$|\Delta_n| \sim x_n^2 / k_n^2. \quad (39)$$

Обращаясь к вопросу о частоте расположения низколежащих надбарьерных зон, рассмотрим наиболее интересный случай достаточно больших k_0 , когда

$$k_0 \gg \max\left(\frac{a}{b^2}, \frac{1}{b}\right). \quad (40)$$

Простой анализ расположения корней дисперсионных уравнений (5) и (6) показывает, что низколежащие энергетические зоны расположены вблизи значений

$$k_n = k_0 + \frac{1}{2k_0} \left(\frac{\pi(l+d)}{b} \right)^2, \quad d < 1, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (41)$$

Таким образом, в случае больших k_0 при переходе от подбарьерных к надбарьерным состояниям наблюдается сгущение энергетических зон вблизи вершины потенциального барьера по закону (41). При этом расстояние между ближайшими надбарьерными зонами

$$k_{n+1} - k_n \approx \frac{\pi^2}{k_0 b^2} (l+d) \quad (42)$$

может оказаться значительно меньшим как по сравнению с расстоянием (32) между подбарьерными зонами, так и по сравнению с π , которое характеризует расстояние между серединами зон в далекой надбарьерной области (см. ниже).

Основной физической особенностью волновых функций низколежащих надбарьерных состояний является большая вероятность нахождения частицы в единице объема над потенциальным барьером по сравнению с соответствующей вероятностью в области над потенциальной ямой. В качестве количественной характеристики этого явления рассмотрим отношение средней плотности частиц над потенциальным барьером к соответствующей величине в яме:

$$\eta = \frac{1}{b} \int_{a/2}^{a/2+b} |\psi_{nq}(x)|^2 dx / \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} |\psi_{nq}(x)|^2 dx. \quad (43)$$

Используя выражение (9) для $\psi_{nq}(x)$ и пренебрегая, как и в (33), величинами $\frac{\sin k_n a}{k_n a}$ и $\frac{\sin \alpha_n b}{\alpha_n b}$ по сравнению с единицей, получим

$$\eta = \frac{S^2 + \frac{k^2}{2^2} Q^2}{1 + Q^2 S^2}. \quad (44)$$

Пусть обе величины $|Q|$ и $|S|$ лежат вблизи своих минимальных или максимальных значений, указанных в (34). Тогда

$$\eta \sim \eta_{\min} \approx \left(1 + \frac{\alpha^2}{4k^2} \sin^2 \pi q\right)^{-1}. \quad (45)$$

Если же одна из величин $|Q|$ и $|S|$ находится около своего максимального, а другая - около минимального значения, то

$$\eta \sim \eta_{\max} \approx \frac{k^2}{\alpha^2} + \frac{1}{4} \sin^2 \pi q. \quad (46)$$

Таким образом, в случае низколежащих надбарьерных состояний величина η , в зависимости от значений Q и S , может изменяться от значений, близких к 1, до значений $\sim \frac{k^2}{\alpha^2} \gg 1$. При этом типичной, по-видимому, является ситуация с $\eta \gg 1$, которая особенно отчетливо прослеживается на границах энергетических зон. В самом деле, учитывая, что одна из величин $\mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{R}, \mathcal{S}$ (3) в невырожденном случае обращается при этом в нуль, для η нетрудно получить

$$\eta = \begin{cases} \frac{k^2 - k_0^2 \cos^2 \frac{\alpha a}{2}}{\alpha^2} & \text{при } q = 0, \text{ если } \mathcal{R} = 0, \\ & \text{и при } |q| = 1, \text{ если } \mathcal{P} = 0; \\ \frac{k^2 - k_0^2 \sin^2 \frac{\alpha a}{2}}{\alpha^2} & \text{при } q = 0, \text{ если } \mathcal{Q} = 0, \\ & \text{и при } |q| = 1, \text{ если } \mathcal{S} = 0. \end{cases} \quad (47)$$

Таким образом, если значения функций $\cos \frac{\alpha a}{2}$ или $\sin \frac{\alpha a}{2}$ хотя бы немного отличаются от 1, а именно такая ситуация и реализуется для подавляющего большинства низколежащих надбарьерных состояний, то значения η на границах энергетических зон оказываются $\gg 1$, свидетельствуя о большом эффекте "зависания" частиц в области над потенциальным барьером.

Важно отметить, что в случае каналирования отрицательно заряженных частиц, которому отвечают узкие ямы и широкие потенциальные барьеры, условие $\eta \gg 1$ означает, что относительная вероятность нахождения частиц в области потенциальной ямы, где

расположены ядра кристалла, оказывается малой, приводя таким образом к эффективному уменьшению взаимодействия частиц с атомами кристалла.

5.4. "Далекая" надбарьерная область.

Нетрудно показать (тем же способом, каким ниже вычислена величина δ (51)), что в надбарьерной области больших k , которым отвечает условие

$$k_0^2/k^2 \ll 1, \quad (48)$$

ширины разрешенных энергетических полос, в соответствии с результатами метода почти свободных электронов, с ростом k стремятся к \mathcal{F} снизу, а щели между зонами спадают к нулю. Выясним, по какому закону происходит это убывание.

Ширина запрещенной энергетической полосы в области больших k определяется, очевидно, расстоянием между двумя ближайшими нулями функций $Q(k)$ и $R(k)$ (границы энергетических зон при $q = 0$) или $P(k)$ и $S(k)$ (при $|q| = 1$). Рассмотрим первый случай. Из определений (3) следует, что с точностью до членов порядка $\frac{k_0^2}{k^2}$

$$Q(k) = \sin \frac{ak + b\alpha}{2} + \frac{k_0^2}{2k^2} \sin \frac{b\alpha}{2} \cos \frac{ak}{2}, \quad (49)$$

$$R(k) = \sin \frac{ak + b\alpha}{2} - \frac{k_0^2}{2k^2} \sin \frac{b\alpha}{2} \cos \frac{ak}{2}.$$

Таким образом, в нулевом по $\frac{k_0^2}{k^2}$ приближении нули функций $Q(k)$ и $R(k)$ совпадают, и их положения $k_n^{(0)}$ определяются уравнением

$$\sin \frac{ak_n^{(0)} + b\alpha}{2} = 0. \quad (50)$$

Вычисляя затем поправки I-го порядка по $\frac{k_0^2}{k^2}$ для положения нулей $Q(k)$ и $R(k)$ соответственно и беря сумму модулей этих поправок, для ширины запрещенной полосы будем иметь

$$\delta = \frac{k_0^2}{k^2} \left| \sin \frac{b\alpha}{2} \cos \frac{ak}{2} \right|$$

или с той же точностью

$$\delta = \frac{1}{2} \frac{k_0^2}{k_n^2} |\sin \delta x_n| + O\left(\frac{k_0^4}{k_n^4}\right). \quad (51)$$

Положения границ энергетических зон при $|q| = \Gamma$ находятся аналогично и приводят к такому же результату. Сравнивая (51) с (22), мы видим, что ширины запрещенных полос уменьшаются с ростом k по такому же закону, что и размеры областей краевой когерентности.

Обращаясь к волновым функциям в далекой надбарьерной области, легко показать, что внутри зоны Бриллюэна вне узких областей краевой когерентности каждая из величин P, Q, R и S (8) равна Γ с точностью до членов порядка k_0^2/k_n^2 и, как следствие, блоховские функции с большой точностью описываются плоскими волнами:

$$\psi_{nq}(x) = e^{ik_n(q)x} + O_1\left(\frac{k_0^2}{k_n^2}\right) \sin k_n(q)x + O_2\left(\frac{k_0^2}{k_n^2}\right) \cos k_n(q)x. \quad (52)$$

Таким образом, сильные когерентные эффекты, обусловленные регулярностью среды, проявляются только в малых областях вблизи границ энергетических зон, приводя к существенному отличию $\psi_{nq}(x)$ в этих областях от плоских волн (см. выше разделы 3.3 и 4).

6. БЛОХОВСКИЕ ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ.

Фурье-компоненты волновых функций находятся следующим образом

$$A_{nq}(K) = \int_{\Omega} e^{-i\pi(q+2K)x} \psi_{nq}(x) dx. \quad (53)$$

Выпишем окончательные выражения для двух видов невырожденных волновых функций (9) и (10), соответственно,

$$A_{nq}(K) = C_{nq}^{(0)} \left\{ (1+QS) \frac{\sin \frac{ka+qa}{2}}{\frac{ka+qa}{2}} + (1-QS) \frac{\sin \frac{ka-qa}{2}}{\frac{ka-qa}{2}} + (-1)^K \frac{Q}{a} \left[(S + \frac{k}{2}Q) \frac{\sin \frac{bx-qa}{2}}{\frac{bx-qa}{2}} + (S - \frac{k}{2}Q) \frac{\sin \frac{bx+qa}{2}}{\frac{bx+qa}{2}} \right] \right\} \quad (54)$$

$$A_{nq}(K) = C_{nq}^{(2)} \left\{ (1+PR) \frac{\sin \frac{ka-q_a}{2}}{\frac{ka-q_a}{2}} - (1-PR) \frac{\sin \frac{ka+q_a}{2}}{\frac{ka+q_a}{2}} + \right. \\ \left. + (-1)^K \frac{b}{a} \left[\left(R + \frac{k}{2}P\right) \frac{\sin \frac{bx-q_e}{2}}{\frac{bx-q_e}{2}} + \left(R - \frac{k}{2}P\right) \frac{\sin \frac{bx+q_e}{2}}{\frac{bx+q_e}{2}} \right] \right\}, \quad (55)$$

где $q_a = \pi a(q+2K)$, $q_e = \pi b(q+2K)$, K нумерует вектора обратной решетки в единицах π/d , $K = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Нетрудно увидеть, что эти величины как под барьером, так и над барьером обладают следующими свойствами симметрии

$$A_{n,-q}(-K) = \pm A_{nq}(K). \quad (56)$$

Знак плюс в правой части относится к виду (54), минус - к (55). Отсюда, кстати, можно получить, что в центре зоны Бриллюэна заселенности (квадраты Фурье-компонент) состояний с противоположно направленными K равны, а на краях зоны Бриллюэна имеет место соотношение

$$A_{n,\pm 1}^2(K) = A_{n,\pm 1}^2(-K \mp 1), \quad (57)$$

верхние знаки отвечают $q = I$, нижние - $q = -I$.

В далекой надбарьерной области коэффициенты $A_{nq}(K)$ вырождаются в символы Кронекера вида δ_{K, q_a+q_e} и $\delta_{K, -q_a-q_e}$, что представляет собой отмеченное во Введении "зеркальное" отражение частиц от плоскостей кристалла.

В вырожденном случае в правую часть (53) надо подставить волновую функцию одного из видов (25) или (26), для каждого конкретного случая, соответственно.

7. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ.

Для того чтобы исследовать все указанные характерные черты, были проведены численные расчеты при различных значениях всех параметров задачи.

Ограничимся для иллюстрации величинами ширин узкой ямы $a = 0.15$ и широкой ямы $a = 0.85$ (в единицах периода решетки d), тремя значениями высот барьера $k_{\text{I}} = 12.039$, $k_{\text{II}} = 98.187$, $k_{\text{III}} = 309.783$, что в энергетических единицах для легких частиц, электронов и позитронов, соответствует I Мэву, 100 Мэвам и I Гэву.

На рис. 1 показана сравнительная зонная структура для узкой ямы и широкой ямы. Как видно из рисунка, в первом случае под барьером находится 5 зон, во втором - 27.

Для глубоких уровней расстояние между соседними уровнями порядка π/a , как и было получено формулой (32). Можно показать, что для ближайших надбарьерных зон расстояние между ними $\sim \pi^2/b^2 \cdot k_0$ (ср. с формулой (42)). Поэтому, как и видно из рисунка, для узкой ямы низколежащие надбарьерные зоны расположены гуще, чем в широкой яме. Для подбарьерных состояний ситуация обратная в силу (32) и (42).

Гистограммы зависимости энергетических щелей δ от номера зоны даны в логарифмическом масштабе для трех различных значений параметра на рис. 2, который показывает, что на общем фоне сужения щелей при удалении от вершины барьера существует осцилляционное поведение ширин запрещенных зон, связанное с изменением надбарьерного отражения. С увеличением высоты энергетического барьера в непосредственной близости к барьеру виден провал огибающей кривой, выраженный четче для узкой ямы, что отвечает более плотному расположению первых надбарьерных зон, указанному выше.

Аналогичная осцилляционная структура проявляется и в зависимости ширин разрешенных энергетических полос с ростом номера

зоны, более заметная для меньших значений параметра k_0 , а также малой ширины ямы. Ширина достаточно далеких энергетических полос приближается к одинаковому значению $\sim K$ (см. раздел 5.4).

Указанные черты отражены в рис. 3а и 3б, на которых изображены в логарифмическом масштабе ширины зон Δ , как функции номера зоны. Трём кривым отвечают те же три различных значения k_0 , что и на рис. 2.

В верхней половине рис. 4 показаны три графика заселенностей зон для $\alpha = 0.15$; первый для $q = 0$, второй - $q = 0.5$ и третий - $q = 1$. На каждом из графиков представлены заселенности для различных углов падения. Соответствие этих углов векторам обратной решетки следующее: 1 - $K=0$, 2 - $K=8$, 3 - $K=15$, 4 - $K=25$. Значение $K=15$ соответствует углу, равному примерно углу каналирования. Параметр k_0 равен $k_{\text{н}}$.

В нижней половине рис. 4 - аналогичные картины для $\alpha = 0.85$.

Из рисунка видно, что при угле 0 заселяются подбарьерные и ближайшие надбарьерные зоны. С увеличением угла падения больше заселяются надбарьерные состояния, причем перевес в их числе явнее при малых α .

На краях же зоны Бриллюэна и в ее центре в результате сильного надбарьерного отражения изменяется характер заселенностей соседних зон.

Рис. 5 представляет заселенности отдельных зон, как функцию вектора обратной решетки K , взятые при $q = 0.5$. Верхняя половина рисунка относится к $\alpha = 0.15$, нижняя - к $\alpha = 0.85$.

Угловое распределение компонент Фурье волновых функций подбарьерных состояний в узкой яме вдали от центра и границ зоны Бриллюэна расширяется с ростом номера зоны, для первого же

надбарьерного состояния имеется узкое распределение, уширяющееся при дальнейшем росте n с приобретением "двуусного" характера.

В случае широкой ямы первые надбарьерные состояния опять преимущественно заселяются под малыми углами.

Плотность распределения блоховских волн в зависимости от координаты построена на рис. 6 и 7.

Волновые функции подбарьерных зон в узкой яме быстро затухают вглубь барьера, имея большую амплитуду внутри ямы, слабо завися от значения квазиимпульса вдоль каждой зоны, для надбарьерных же состояний волновые функции имеют осцилляционную структуру с малой амплитудой над ямой и большей над барьером, частота которых приблизительно соответствует частоте колебаний в изолированном звене потенциала.

Малая величина плотности частиц над ямой отвечает аномальному прохождению электронов.

Поведение волновых функций подбарьерных зон в широкой яме аналогично характеру тех же состояний в узкой яме с затуханием вглубь барьера, но с меньшей амплитудой колебаний (~ 2). На рис. 7 представлена картина для двух последних подбарьерных зон и трех первых надбарьерных состояний. Волновые функции n -ой зоны в яме имеют число узлов, равное $n-1$ (как в отдельном звене потенциала). В области барьера же подбарьерные волновые функции затухают, а надбарьерные проявляют зависание над барьером (рост амплитуды). Заметна тенденция стремления волновых функций дальних надбарьерных зон к плоским волнам внутри зон и к стоячим — на краях и в центре зоны Бриллюэна, например, для 10-ой зоны на рис. 6 и для 29-ой — на рис. 7.

Все указанные специфические черты характеризуют особенности

поведения заряженных частиц в кристаллах, влияя на выход ядерных реакций, рассеяния проходящих частиц, угловые распределения и эволюцию их с толщиной.

Эти аспекты будут рассмотрены отдельно.

Авторы благодарят чл.-корр. АН СССР Ю. М. Кагана, постоянный интерес которого к кругу вопросов, связанных с квантовой теорией каналирования, в значительной степени стимулировал появление настоящей работы.

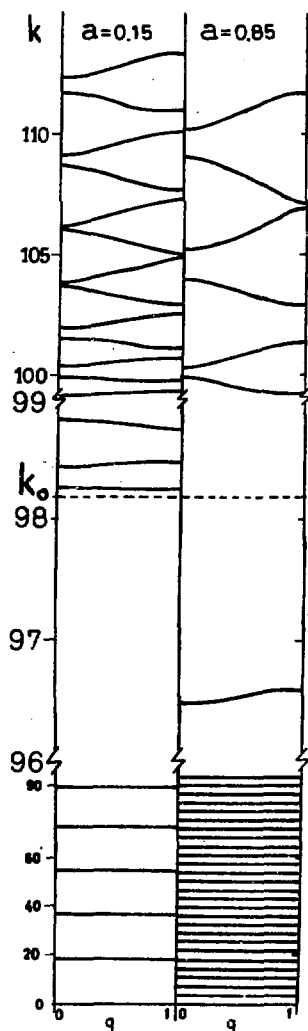
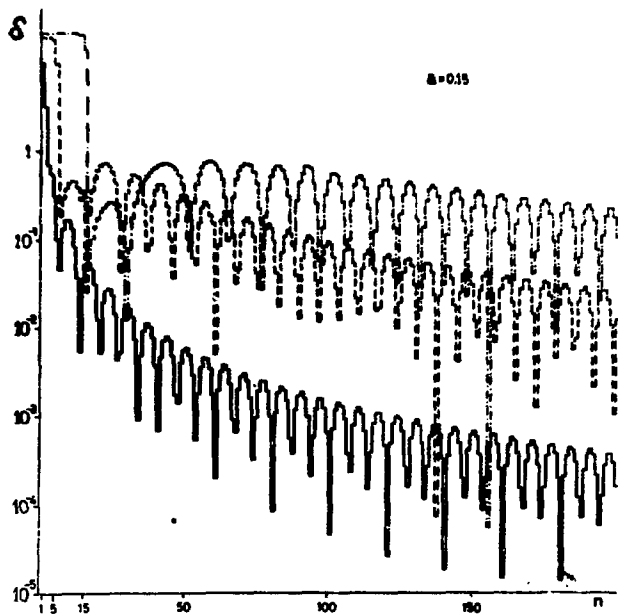
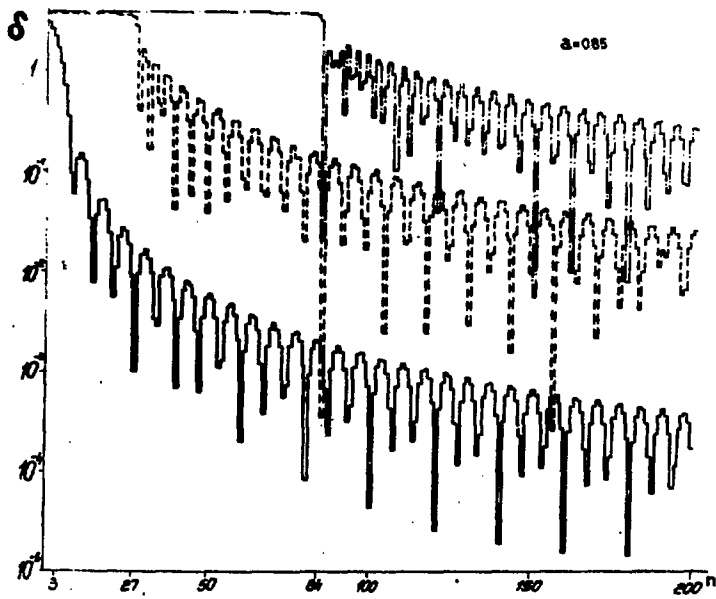


Рис. I

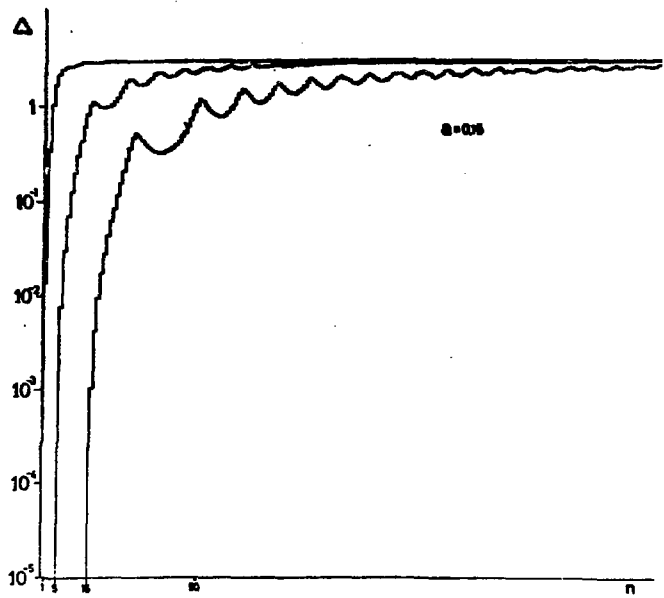


a)

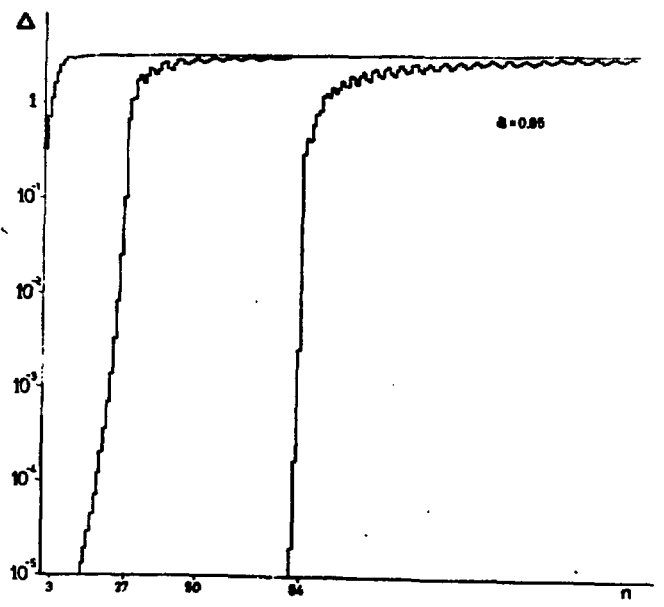


b)

Рис. 2



a)



b)

Рис. 3

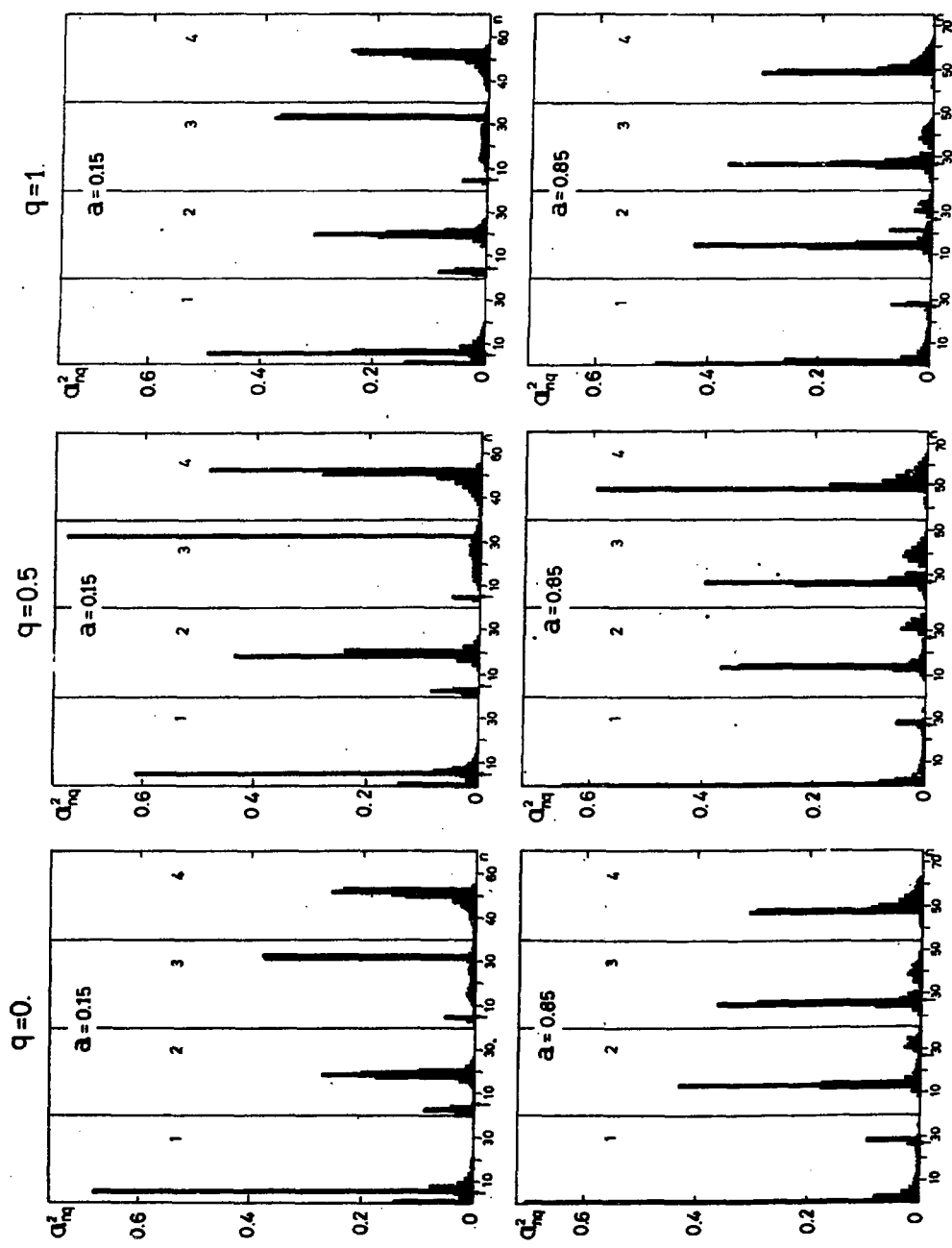


Рис. 4

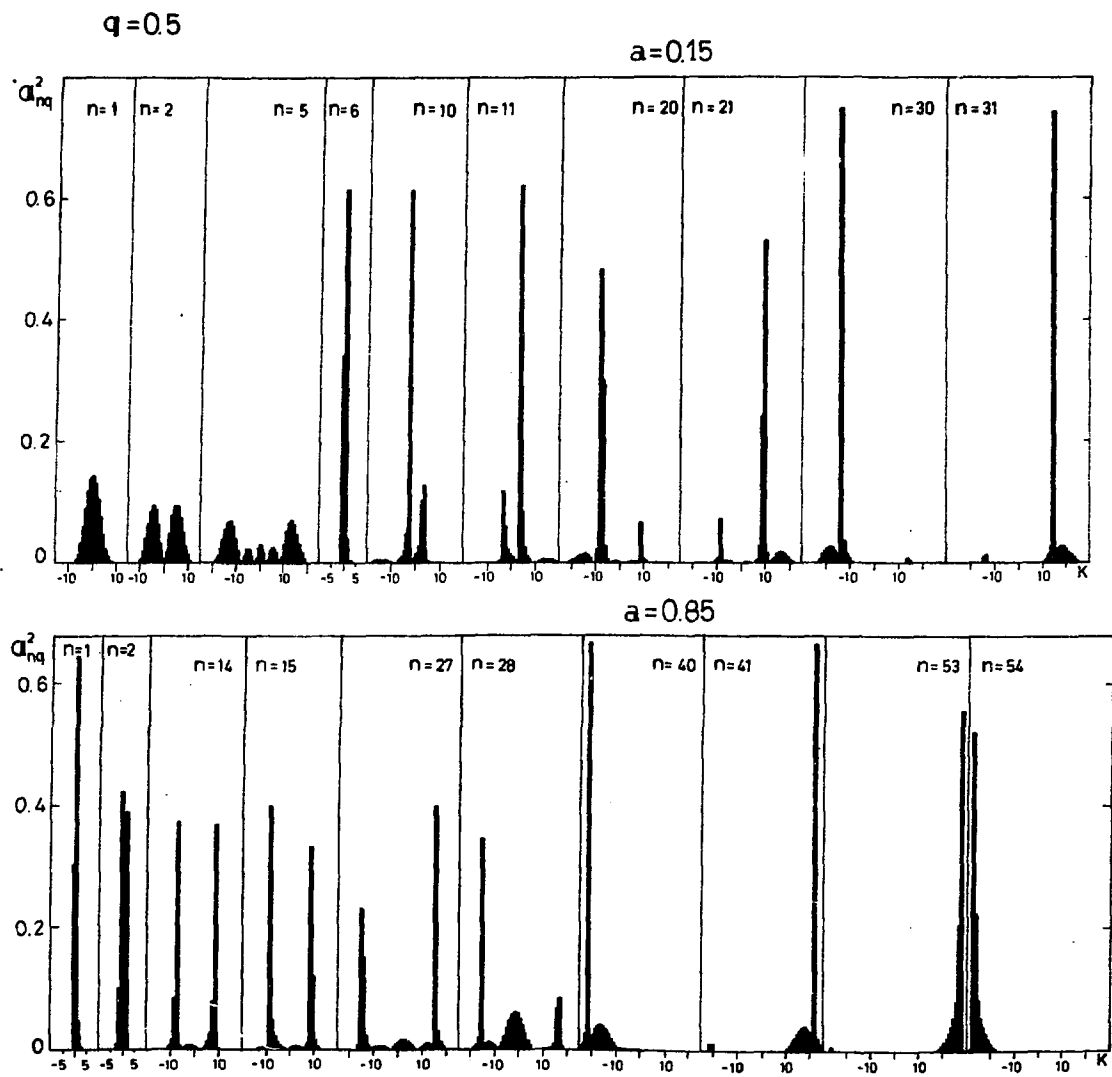


Рис. 5

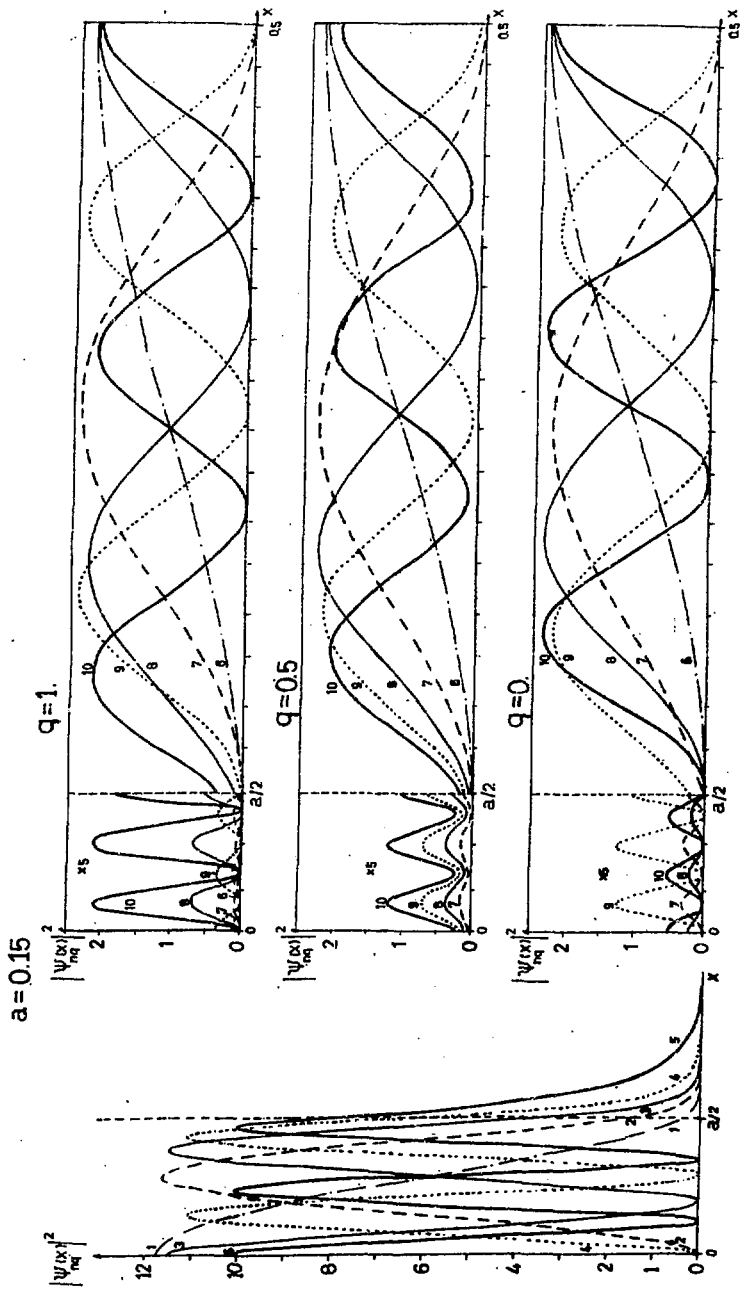


Рис. 6

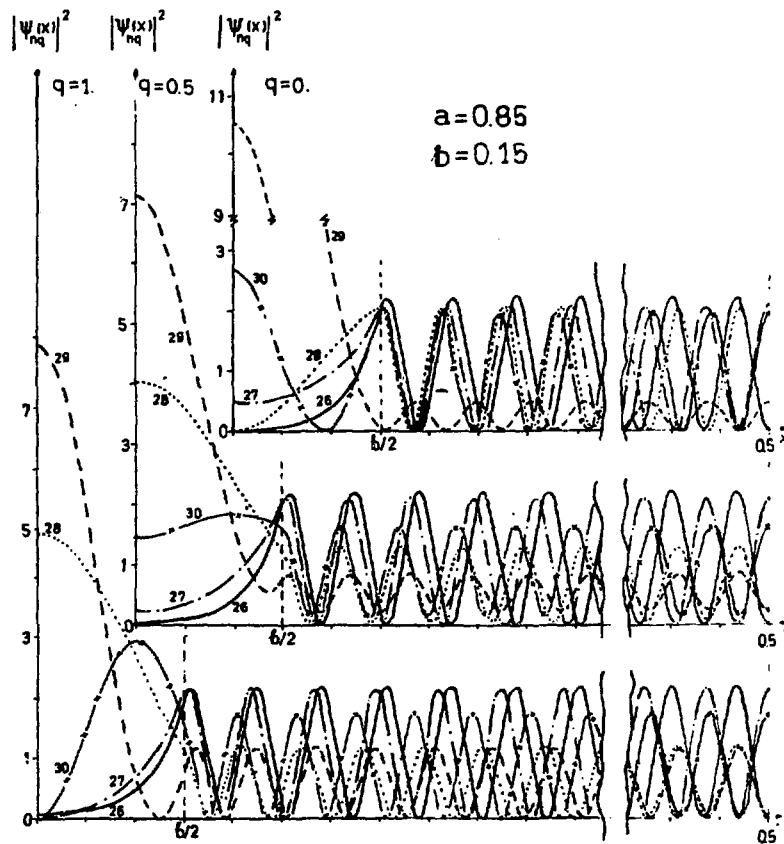


Рис. 7

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис. 1. Сравнительная зонная структура для узкой ямы шириной 0.15 и широкой - 0.85; параметр k_0 равен k_{II} (пунктир); шкала энергии вблизи барьера более растянутая, а под барьером сжатая по сравнению с далекой надбарьерной областью.

Рис. 2. Гистограмма зависимости энергетических щелей δ от номера зоны n в логарифмическом масштабе для трех различных значений k_0 , сплошная линия соответствует k_{I} , пунктирная - k_{II} , прерывистая - k_{III} .
Рис. а для $\alpha = 0.15$, рис. б - $\alpha = 0.85$.

Рис. 3. Ширины зон Δ как функция номера зоны n . Трех кривым отвечают те же три значения k_0 , что и на рис. 2 (нижней кривой - k_{I} , средней - k_{II} , верхней - k_{III}).
Рис. а для $\alpha = 0.15$, рис. б - $\alpha = 0.85$.

Рис. 4. Заселенности зон. Три графика в верхней половине - для $\alpha = 0.15$, первый при $q = 0$, второй - $q = 0.5$, третий - $q = 1$. На каждом из графиков построены заселенности для различных углов падения, обозначенные следующим образом: 1 - угол 0, 2 - $\vartheta_0/2$, 3 - ϑ_0 , 4 - $\frac{3}{2}\vartheta_0$; параметр k_0 равен k_{II} .
Нижняя половина - аналогичная картина, но для $\alpha = 0.85$.
Число подбарьерных зон отмечено стрелками на осях абсцисс и равно 5 и 27, соответственно.

Рис. 5. Угловые распределения компонент Фурье волновых функций как функция вектора обратной решетки K , взятые при $q_y = 0.5$. Верхняя половина рисунка относится к $\alpha = 0.15$, нижняя - к $\alpha = 0.85$.

Рис. 6. Плотность распределения блоховских волн в зависимости от координаты. За начало отсчета по оси абсцисс взят центр ямы ($\alpha = 0.15$). Рисунок приведен для полупериода кристаллической решетки из-за симметрии относительно $x = 0$. Слева дана картина для первых пяти зон (подбарьерных), не зависящая от квазиимпульса q_y ; три графика справа - для следующих пяти зон (надбарьерных) на границах зон Бриллюэна и в серединах, соответственно. Цифры у кривых обозначают номер зоны.

Рис. 7. Плотность распределения блоховских волн по координате. Обозначения аналогичны рис. 6, только нулю по оси абсцисс отвечает центр барьера ($\alpha = 0.85$).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.Каган, Ю.В.Кононец. ЖЭТФ, 58, 226, 1970.
2. Ю.Каган, Ю.В.Кононец. Взаимодействие частиц с веществом. сб. под ред. М.И.Рязанова, МИФИ, Москва, 1977.
3. V.V.Karlin, D.E.Popov, S.A.Vorobiev. Phys.St.Sol.(b), 86, K35, 1978.
А.А.Воробьев и др. Изв. вузов СССР, № I, II2, 1978.
4. R.de L.Krönig and W.J.Penney. Proc.Roy.Soc., A130, 499, 1930.
5. R.A.Smith. Wave Mechanics of Cryst.Sol., Chapman & Hall, London, 1961.
6. Г.Джонс. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. Мир, Москва. 1968.
7. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. "Наука", Москва, 1974.
8. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, "Наука", Москва, 1964.

Рукопись поступила 19-го июня 1978 г.

Редактор Л.П.Мукаян
Тех.редактор А.С.Абрамян

Заказ I54

ВФ-05888

Тираж 299

Препринт ЕФИ

Формат издания 60x84/16

Подписано к печати 24/У-79г.

2,5 уч.изд.л. Ц. 18 к.

Издано Отделом научно-технической информации
Ереванского физического института, Ереван-36, пер.Маркаряна 2



индекс 3624