

Частицы в конечных и бесконечных одномерных периодических цепочках

И.Ф. Гинзбург

Движение частицы в одномерной кристаллической решётке изучается с помощью метода матрицы переноса (transfer matrix). Разбирается переход от конечной решётки к бесконечной. В случаях, не допускающих аналитического решения, метод позволяет вычислить возникающие энергетические спектры по известному ячеечному потенциалу с приемлемой погрешностью. Оказывается, что в идеальной решётке структура возникающих разрешённых и запрещённых зон содержит некоторые черты, отсутствующие в реальном мире. Это означает, что для описания действительности модель идеальной решётки должна быть дополнена. Показано, что таким дополнением может служить учёт малых хаотических нарушений периодичности. Тем же методом изучается распространение света в слоистой среде (включая фотонный кристалл).

Ключевые слова: периодические решётки, конечные решётки, матрица переноса, случайные возмущения, приближения сильной и слабой связи

PACS numbers: 03.65. – w, 71.15. – m, 42.70.Qs

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2019.12.038709>

Содержание

1. Введение (429).
2. Матрица переноса (430).
3. Состояния в зонах бесконечных решёток (431).
 - 3.1. Разрешённые зоны. 3.2. Запрещённые зоны. Полубесконечная цепочка. Поверхностные уровни. 3.3. Общая картина. 3.4. Большая энергия электрона. Случай слабой связи. 3.5. Случай сильной связи.
4. От бесконечной решётки к конечной (433).
 - 4.1. Матрица переноса для конечного числа ячеек. 4.2. Случай $E < 0$. 4.3. Случай $E > 0$.
5. Некоторые следствия нарушения периодичности (435).
6. Заключение. Возможные продолжения (435).
7. Приложения (436).
 - А. Слегка несимметричная двойная яма. Б. Коллекция точно решаемых моделей. В. Свет в слоистой среде. Фотонные кристаллы.

Список литературы (440).

1. Введение

Изучение движения частиц в цепочке повторяющихся потенциальных центров на прямой (в одномерном кристалле) является неслучайным элементом многих курсов квантовой механики (см., например, [1–7]). Эти

задачи дают основу для понимания многих явлений физики твёрдого тела и родственных им.

Обычное изложение указанных вопросов состоит в формулировании некоторых общих положений для любой периодической решётки, а затем — в изучении явления на каком-нибудь специальном примере, допускающем аналитическое исследование, с распространением результатов на общий случай. Для таких примеров используются упрощённые формы потенциала в ячейке — *ячеечного потенциала*. Соответствующие описания претендуют только на доказательство существования зонной структуры и некоторых её основных черт. Остаётся открытым вопрос: представляют ли отдельные черты получающихся решений общие свойства периодических структур или они связаны с особенностями используемых моделей (прямоугольные границы или δ -функции, синусоидальные решётки и т.п.)? Отыскание соответствующих зависимостей для реализующихся потенциалов молчаливо считается слишком сложной задачей, поэтому в исследованиях используют их упрощённые формы или просто аппроксимацию результатов измерений.

В статье применяется известный метод матрицы переноса (transfer matrix) [8] (см. раздел 2). В известных автору работах (см. также [5, 11]) этот метод используется для отдельных моделей бесконечных решёток и общие выводы в значительной мере основываются на анализе этих примеров¹. В отличие от этого, мы строим описания, пригодные при произвольной форме ячеечного потенциала. Коллекция известных автору примеров, допускающих аналитическое исследование (и лишь слабо напоминающих реальные потенциалы), собрана в приложении Б. При известном виде ячеечного потенциала форму-

И.Ф. Гинзбург, Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, просп. Академика Коптюга 4, 630090 Новосибирск, Российская Федерация; Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 2, 630090 Новосибирск, Российская Федерация
E-mail: ginzburg@math.nsc.ru

Статья поступила 23 апреля 2019 г.,
после доработки 25 октября 2019 г.

¹ В близком к используемому подходу методе рекуррентных соотношений [12] свойства запрещённых зон остаются вне внимания исследователя.

лы раздела 2 дают, в частности, простой алгоритм вычисления закона дисперсии с приемлемой погрешностью по известному виду ячеечного потенциала после численного решения уравнения Шрёдингера на ячейке.

Общие свойства состояний в бесконечных периодических решётках обсуждаются в разделе 3. Кратко описываются разрешённые и запрещённые зоны энергии, приближение сильной связи строится вне зависимости от вида ячеечного потенциала. Оказывается, что для ячеечного потенциала любого вида при большой энергии электрона сохраняются запрещённые зоны энергии, что противоречит физическим ожиданиям. (Автору неизвестны обсуждения этой проблемы в литературе.) Это означает, что для описания реальных решёток модель чисто периодического потенциала требует дополнения. Таким дополнением может служить учёт небольших случайных отклонений от периодичности, обсуждаемый в разделе 5. Учёт таких отклонений позволяет ответить и на вопрос о том, почему в реальных веществах зонная структура с обобществлением электронов по всему кристаллу реализуется только для электронов верхних уровней энергии (например, валентных), а остальные электроны можно считать локализованными вблизи соответствующих ионов.

Исследование свойств конечных решёток рассматривается обычно как введение к изучению бесконечных периодических решёток. Стандартное численное исследование состояний конечной решётки при умеренно большом числе ячеек включает в себя накопление погрешностей при последовательных переходах через границы ячеек, при этом результирующая погрешность результатов контролируется не очень хорошо. В то же время изучение системы уровней и (или) областей прозрачности для конечных решёток с более или менее правдоподобным ячеечным потенциалом имеет самостоятельную ценность. Метод матрицы переноса позволяет решить эти вопросы и является свободным от накопления погрешностей при изучении конечных решёток (см. раздел 4). Выясняется, в частности, что изменение граничных условий для задачи о связанных состояниях приводит просто к сдвигу положения уровней внутри разрешённой зоны, а для задачи рассеяния — к небольшому сдвигу границ запрещённой зоны. Формулы раздела 4 дают, в частности, алгоритм вычисления положения уровней и границ зон непрозрачности по известному виду ячеечного потенциала после численного решения уравнения Шрёдингера на ячейке.

В приложении В метод матрицы переноса применяется для описания распространения света в слоистой структуре — стопке из большого числа плоскопараллельных пластинок, где естественным образом возникает и понятие фотонного кристалла (см., например, [9]).

2. Матрица переноса

Рассматриваются состояния электронов в системе из N одинаковых ячеек длиной a (*параметр решётки*) с потенциалом произвольной формы в каждой из них. Реализуются решётки с большим конечным N . Принято считать, что при $N \rightarrow \infty$ мы переходим к *периодической решётке*, обсуждаемой во многих учебниках.

Наборы состояний в периодической решётке и конечной решётке различаются. Стационарные состояния частиц в решётке конечных размеров — стоячие волны с фазовыми соотношениями, зависящими от деталей гранич-

ных условий. В периодической решётке возникают состояния, сходные с бегущими волнами в бесконечном пространстве. Как и в бесконечном пространстве, стоячие волны можно считать суперпозициями бегущих и наоборот. Тем не менее результаты исследования периодических решёток прикладываются (и успешно) к описанию реальных решёток. Это означает, что при больших N детали граничных условий слабо влияют на результаты. В разделе 4 мы обсудим, как это происходит.

Гамильтониан системы записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{n=0}^{N-1} U(x - na), \quad (1)$$

где $U(y) = 0$ при $y \leq 0$, $y > a$.

Мы не делаем предположений о виде зависимости $U(x)$ в пределах ячейки.

Обозначим через E энергию электрона, и при $E > 0$ или $E < 0$ соответственно

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}. \quad (2)$$

Матрица переноса. При заданной энергии электрона E уравнение Шрёдингера на ячейке ($0 \leq x < a$) имеет два линейно независимых решения, обозначим их как $\phi_1(x, E)$ и $\phi_2(x, E)$. Общее решение для $(n+1)$ -й ячейки имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(x, E)|_{na < x < (n+1)a} = & c_1^{(n+1)} \phi_1(x - na, E) + \\ & + c_2^{(n+1)} \phi_2(x - na, E). \end{aligned} \quad (3)$$

На границах ячеек и волновая функция, и её производная непрерывны, условия сшивания на границе первых двух ячеек имеют вид

$$\psi(a-0) = \psi(a+0), \quad \psi'(a-0) = \psi'(a+0). \quad (4)$$

Подставляя равенства (3), запишем эти условия в виде матричного соотношения:

$$\begin{aligned} \hat{A} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} &= \hat{B} \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \phi_1(a) & \phi_2(a) \\ \phi_1'(a) & \phi_2'(a) \end{pmatrix}, \\ \hat{B} &= \begin{pmatrix} \phi_1(0) & \phi_2(0) \\ \phi_1'(0) & \phi_2'(0) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Это соотношение можно представить в виде

$$\begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \hat{T} = \hat{B}^{-1} \hat{A} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Матрицу $\hat{T}$ называют матрицей переноса (transfer matrix). (Эта матрица реализует оператор конечного сдвига $\hat{T}_a$ на базисе функций ϕ_1 и ϕ_2 .)²

Определители матриц $\hat{B}$ и $\hat{A}$ — это вронскианы $W(x) = \phi_1(x)\phi_2'(x) - \phi_2(x)\phi_1'(x)$, взятые при $x=a$ и $x=0$. Вронскиан линейного дифференциального уравнения второго порядка, не содержащего первой производной,

² С технической точки зрения иногда удобно разбить ячейку на отдельные участки, найти матрицы переноса $\hat{T}_x$ для каждого из них, а затем построить обсуждаемую матрицу переноса на ячейке как произведение $\hat{T} = \hat{P} \hat{T}_x$. Так строится, например, матрица переноса для электромагнитной волны в стопке плоскопараллельных пластинок (см. приложение В).

не зависит от координат, т.е. $W(a) = W(0)$. Поэтому $\det \hat{T} = 1$. Поскольку без ограничения общности решения ϕ_1 и ϕ_2 можно выбрать действительными, след матрицы переноса $\text{Tr}(\hat{T}) \equiv 2\Lambda(E)$ также является действительной величиной³:

$$\Lambda(E) = \frac{\phi_1(0)\phi_2'(a) + \phi_1(a)\phi_2'(0) - \phi_2(0)\phi_1'(a) - \phi_2(a)\phi_1'(0)}{4W(0)}. \quad (6)$$

Собственные значения матрицы переноса $\lambda_{1,2}$ зависят от вида ячеечного потенциала и от энергии E , они определяются из квадратного уравнения

$$\lambda^2 - \text{Tr}(\hat{T})\lambda + \det \hat{T} \equiv \lambda^2 - 2\Lambda(E)\lambda + 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1\lambda_2 = 1, \quad \lambda_1 + \lambda_2 = 2\Lambda(E). \quad (7)$$

Диагонализация матрицы $\hat{T}$ даёт

$$\hat{T} = \hat{R}^{-1} \hat{V} \hat{R}, \quad \text{где } \hat{V} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Для цепочки из N ячеек определяется матрица переноса по всей цепочке $\hat{T}^{\text{tot}}$:

$$\begin{pmatrix} c_1^{(N+1)} \\ c_2^{(N+1)} \end{pmatrix} = \hat{T}^{\text{tot}} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \text{где } \hat{T}^{\text{tot}} = \hat{T}^N \equiv \hat{R}^{-1} \hat{V}^N \hat{R}. \quad (9)$$

• Если $|\Lambda(E)| \leq 1$, то числа λ_i комплексны и по абсолютной величине равны единице (поскольку $\lambda_1\lambda_2 = 1$); обозначим $\lambda_1 = \exp(iqa)$. Тогда $\lambda_2 = \exp(-iqa)$. Величину $\hbar q$ (а нередко и величину q) называют *квазиимпульсом*⁴. При этом

$$\lambda_1 = \exp(iqa), \quad \lambda_2 = \exp(-iqa), \quad \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(qa) = 2\Lambda(E). \quad (10)$$

Изменение q на величину, кратную $2\pi/a$, не меняет собственного значения λ . Следовательно, физически осмысленный интервал изменения квазиимпульса имеет длину $2\pi\hbar/a$. Принято определять квазиимпульс в интервале (первая зона Бриллюэна)

$$q \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right). \quad (11)$$

Реализуемые значения квазиимпульса определяются граничными условиями. В частности, для периодической решётки $q = \pi r/(Na)$ с целым r и $|r| \leq N/2$, т.е. число состояний в соответствующей зоне равно числу ячеек.

• Если $|\Lambda(E)| > 1$, то собственные значения действительны:

$$\lambda_i \equiv \Lambda \pm \sqrt{\Lambda^2 - 1}; \quad \lambda_1 = \frac{\Lambda(E)}{|\Lambda(E)|} \exp(\beta a), \quad \lambda_2 = \frac{\Lambda(E)}{|\Lambda(E)|} \exp(-\beta a), \quad |\lambda_1 + \lambda_2| = 2 \cosh(\beta a) = 2|\Lambda(E)|, \quad \beta > 0. \quad (12)$$

Величину β мы называем *показателем убывания*, можно понимать β как мнимый квазиимпульс. Граничные условия не ограничивают возможных значений β .

3. Состояния в зонах бесконечных решёток

Зависимость Λ от энергии E — непрерывная функция. Небольшому изменению E отвечает и небольшое изменение $\Lambda(E)$. Для бесконечной решётки значения E , для которых выполнено условие $|\Lambda(E)| \leq 1$, образуют непрерывные области — *разрешённые энергетические зоны* T_p . Разрешённые зоны чередуются с зонами, в которых $|\Lambda(E)| > 1$, — *запрещёнными зонами* S_p (p — номер зоны в порядке возрастания энергии начиная с $p = 1$).

3.1. Разрешённые зоны

При $|\Lambda(E)| \leq 1$ соотношение (10) можно читать как уравнение для определения зависимости энергии от квазиимпульса q — *закона дисперсии* $E(q)$. Видно, что при одном значении энергии реализуются два решения, с квазиимпульсами q и $-q$, т.е. собственные состояния гамильтониана двукратно вырождены (как и при свободном движении) — *теорема Крамерса*:

$$E(-q) = E(q). \quad (13)$$

Подставляя волновую функцию (3) в известное выражение для плотности тока вероятности [13], нетрудно убедиться в том, что решения с определённым квазиимпульсом описывают частицы, распространяющиеся по периодической решётке без затухания. Иными словами, собственные векторы матрицы $\hat{T}$ являются общими собственными векторами гамильтониана и оператора конечного сдвига, отвечающими одной энергии и разным знакам квазиимпульса (движению электрона в положительном или отрицательном направлениях на решётке.)

• В силу (13) значение $q = 0$ отвечает экстремуму, и при $qa \ll 1$ можно записать

$$E(q) = E_0 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}. \quad (14)$$

Коэффициент m^* называют *эффективной массой*. Если $m^* < 0$, то говорят об отрицательных массах. В большинстве случаев величина $|m^*|$ близка к массе электрона m_e , в разных кристаллах $0,05m_e \leq |m^*| \leq 100m_e$. Эффективная масса положительна в зонах T_p с нечётным p и отрицательна в зонах T_p с чётным p .

• Нетрудно увидеть, что соотношение типа (13) получается и вблизи верхней границы изменения квазиимпульса (на границе зоны Бриллюэна)

$$E\left(\frac{\pi}{a} - q\right) = E\left(\frac{\pi}{a} + q\right). \quad (15)$$

Отсюда следует, что $dE/dq|_{(q=\pi/a)} = 0$ и, по аналогии с (14), можно вводить понятие эффективной массы и для малых отклонений квазиимпульса от π/a .

• Собственную функцию матрицы переноса — общую собственную функцию операторов конечного сдвига и энергии — нередко представляют в следующем виде: $\psi = \exp(iqx)u_q(x)$, где *блеховская амплитуда* $u_q(x)$ — периодическая функция:

$$\psi = \exp(iqx)u_q(x), \quad u_q(x+a) = u_q(x). \quad (16)$$

Набор функций Блоха $\exp(iqx)u_q(x)$ полон.

³ Изменение базиса не меняет определителя и следа матрицы. Поэтому конкретные вычисления можно вести и с более удобными для некоторых задач комплексными ϕ_i .

⁴ Обратим внимание, что понятие квазиимпульса введено для конечной решётки.

3.2. Запрещённые зоны. Полубесконечная цепочка.

Поверхностные уровни

При $|A(E)| > 1$ вероятность пребывания электрона в ячейке возрастает при увеличении или уменьшении номера ячейки как $\exp(2\beta n)$ или $\exp(-2\beta n)$ (12), становясь бесконечно большой при $n \rightarrow \infty$ или $n \rightarrow -\infty$, что недопустимо. Для бесконечной цепочки такие решения не могут реализовываться, поэтому такая зона называется *запрещённой*. В запрещённой зоне зависимость $|A|$ от E имеет вид горба, растущего от границ, где эта величина обращается в единицу, до некоторого максимального значения, соответственно, и показатель убывания β изменяется от нуля до некоторого максимального значения.

В *полубесконечной решётке* ($x \geq 0$) может реализоваться решение, отвечающее собственному значению $\lambda_2 = \pm \exp(-\beta a)$ (12).

Вблизи плоской границы трёхмерного кристалла разумно говорить о смещениях, параллельных границе ℓ и перпендикулярных ей. Эти состояния представляют собой волны, распространяющиеся вдоль поверхности (с квазиимпульсом q_ℓ) и затухающие по мере удаления от границы (с показателем убывания β). Соответствующие *поверхностные уровни* обнаружены И.Е. Таммом в 1932 г.

3.3. Общая картина

В приложении Б собрана коллекция известных автору решений для отдельных бесконечных решёток. Их можно рассматривать как иллюстрации к общей картине, обсуждаемой для произвольного ячеечного потенциала.

В частности, в системе возникают чередующиеся разрешённые и запрещённые энергетические зоны, чередуются и знаки их эффективных масс. Для самой низкой зоны эффективная масса положительна. Если задача о движении в поле отдельной ячейки со свободными концами имела дискретные уровни энергии, то эти значения энергии оказываются внутри разрешённых зон, наименьшие значения энергии в этих зонах меньше энергии "материнских" уровней. С возрастанием E ширина запрещённых зон уменьшается.

При небольших энергиях детали зависимости $A(E)$ не поддаются общему описанию — они зависят от вида ячеечного потенциала. С возрастанием E влияние деталей формы ячеечного потенциала на движение частиц становится всё слабее.

3.4. Большая энергия электрона. Случай слабой связи

Случай, в котором энергия электрона заметно превышает характерные значения ячеечного потенциала, допускает описание, слабо зависящее от формы этого потенциала. Удобно фиксировать уровень отсчёта энергии требованием, чтобы среднее значение потенциала на ячейке обратилось в нуль:

$$\int_0^a U(x) dx = 0. \quad (17)$$

В любой идеальной решётке для электронов с большой энергией E мы вступаем в область *слабой связи*, описываемой малостью параметра μ :

$$\mu = k \int_0^a \frac{U^2(x) dx}{8E^2} \ll 1. \quad (18)$$

При выполнении этого условия слабые возмущения, вызываемые потенциальным рельефом, лишь несущественно деформируют свободное движение и для ба-

зисных функций (3) можно использовать квазиклассическое приближение ("почти свободное движение"), $\phi_{1,2} = \exp[\pm i\sqrt{2m(E - U(x))}/\hbar]$. После подстановки в (6) отсюда получается

$$A_{\text{weak}}(E) = \cos\left(\int_0^a \sqrt{\frac{2m(E - U(x))}{\hbar^2}} dx\right) \approx \cos[(ka) - \mu] \approx \cos(ka) + \mu \sin(ka). \quad (19)$$

т.е. закон дисперсии (10) принимает вид

$$\cos(ka) + \mu \sin(ka) = \cos(qa). \quad (20)$$

До тех пор пока k не очень близко к π/a , слагаемым, пропорциональным μ , можно пренебречь, и мы имеем дело с разрешёнными зонами, в которых закон дисперсии лишь слабо отличается от закона дисперсии в случае свободных частиц (с естественной заменой $q \rightarrow k - 2\pi/a$ или $q = \pi(2n + 1)/a - k$).

При приближении величины ka к значению π учёт слагаемого, пропорционального μ , в левой части закона дисперсии может вывести $A(E)$ за пределы допустимой области $(-1, 1)$ здесь возникают *запрещённые зоны*⁵. Чтобы охарактеризовать эти зоны, запишем $ka = \pi n + \varepsilon$. След матрицы переноса выходит за пределы разрешённой зоны $(+1, -1)$ при $-\varepsilon^2/2 + \varepsilon\mu \geq 0$. Таким образом, вблизи каждого значения $k = \pi n/a$ располагается узкая запрещённая зона со следующими свойствами (ср. с (12)):

$$\text{границы зоны:} \quad \frac{\pi n}{a} \leq k \leq \frac{\pi n}{a} + \frac{2\mu}{a}; \quad (21)$$

$$\text{показатель затухания:} \quad \beta \leq \frac{\mu}{a}.$$

С возрастанием энергии границы запрещённых зон сужаются и возможные значения коэффициента затухания уменьшаются, но сами эти зоны не исчезают — вопреки физическому пониманию явлений. Это указывает на неприменимость модели чисто периодического потенциала к описанию действительности при больших E . Необходимые модификации модели обсуждаются в разделе 5.

Некоторые авторы случаем слабой связи называют и ситуацию с медленными частицами, в которой характерная энергия поля $\tilde{U}$ мала по сравнению с энергией локализации электрона на ячейке $E_{\text{loc}} \approx \hbar^2/2ma^2$ (см., например, [11]). Для такой задачи алгоритм вычисления матрицы перехода в аналитическом виде и анализ явлений на решётке с ячеечным потенциалом произвольной формы нам не известны. Решение для синусоидального потенциала, получаемое с помощью теории возмущений, можно найти, например, в [4, 11].

3.5. Случай сильной связи

Приближение сильной связи отвечает ситуации, в которой поле отдельной ячейки таково, что состояние частицы в этой ячейке (без окружения другими ячейками) локализовано в области с размером, заметно меньшим параметра решётки a , и волновая функция быстро убывает при приближении к границам ячейки. Иными

⁵ При $ka \approx \pi$ (при энергиях $E \approx \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$) на ячейке укладывается целое число полуволн. При этом отражённый на следующей ячейке сигнал может вернуться в противофазе, так что многократные отражения приведут к непрозрачности.

словами, до появления соседей электрон локализовывался в небольшой окрестности иона (отдельной ячейки) — в "ячеечке" размером $a_0 \ll a$ — и его волновая функция быстро убывала при $x > a_0$, так что коэффициент туннелирования между ячейками (интеграл перекрытия с соседями) D мал. Разрешённая зона получается узкой, в её пределах все появляющиеся величины, кроме величины T_{11} , можно считать постоянными.

Обозначим через E_ℓ энергию уровня "родительской" ямы, порождающей изучаемую зону. Матрицу переноса для перехода между краями ячейки при энергии E обозначим как

$$\hat{T}_V = \begin{pmatrix} \theta_{11}(E) & \theta_{12}(E) \\ \theta_{21}(E) & \theta_{22}(E) \end{pmatrix}.$$

Условие существования уровня в этой яме читается как $\theta_{11}(E_\ell) = 0$ (ср. с (29) в разделе 4.2). Вне ячейки движение почти свободное и эволюция волновых функций описывается коэффициентом туннелирования D , так что дополнительная матрица сдвига для движения к границам ячейки имеет вид⁶

$$\hat{T}_a = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{D}} & 0 \\ 0 & \sqrt{D} \end{pmatrix}.$$

Полная матрица переноса

$$\hat{T} = \hat{T}_V \hat{T}_a = \begin{pmatrix} \frac{\theta_{11}}{\sqrt{D}} & \theta_{12}\sqrt{D} \\ \frac{\theta_{21}}{\sqrt{D}} & \theta_{22}\sqrt{D} \end{pmatrix}. \quad (22)$$

След этой матрицы $\Lambda = \theta_{11}/\sqrt{D} + \theta_{22}\sqrt{D}$ при достаточно малых значениях D сводится к первому слагаемому и дисперсионное соотношение (10) принимает вид

$$\frac{\theta_{11}(E)}{\sqrt{D}} = 2 \cos(qa). \quad (23)$$

Так как $1/D \gg 1$, левая часть оказывается меньше 2 по абсолютной величине только при небольших значениях коэффициента $\theta_{11}(E)$, т.е. при энергиях E , близких к энергии "родительского" уровня E_ℓ . Для грубой оценки полезно обозначить через E_r энергию ближайшего к E_ℓ уровня "родительской" ямы (или $E_r = 0$, если такого уровня нет). Тогда при энергии E , близкой к E_ℓ , можно записать $\theta_{11}(E) = C_\ell(E - E_\ell)$ с таким коэффициентом C_ℓ , что⁷ $C_\ell(E_r - E_\ell) \sim 1$. В итоге закон дисперсии принимает вид, одинаковый для всех форм ячеечного потенциала:

$$E - E_\ell = \Delta\epsilon_\ell \cos(qa), \quad \Delta\epsilon_\ell \equiv \frac{E_{\max} - E_{\min}}{2} = \left| 2 \frac{\sqrt{D}}{C_\ell} \right|. \quad (24)$$

Ширина зоны $2\Delta\epsilon_\ell$ мала, а эффективная масса (14) велика:

$$\Delta\epsilon_\ell \sim \sqrt{D}|E_\ell - E_r|, \quad m^* \sim \frac{\hbar^2}{(E_\ell - E_r)a^2\sqrt{D}}. \quad (25)$$

⁶ В упрощённой картине между ямами $U = 0$ и базисные волновые функции вне ячейки имеют вид $\exp(\pm \kappa x)$, с $\kappa = (2m|E|/\hbar^2)^{1/2}$, так что коэффициент туннелирования $D = \exp(-2\kappa a)$.

⁷ Например, для решётки из δ -ям анализ уравнения (44а) даёт $C_\ell = 1/(2E_\ell)$, в квазиклассическом случае $C_\ell \approx 4\pi/|E_\ell - E_{\ell+1}|$, где $E_{\ell+1}$ — энергия соседнего уровня в отдельной ячейке.

(Отклонение центра зоны от энергии, отвечающей "родительскому" уровню, обусловлено отброшенной малой поправкой $\theta_{22}\sqrt{D}$, это отклонение порядка $D|E_\ell - E_r|$.)

При увеличении коэффициента туннелирования (при выходе из области сильной связи) вид закона дисперсии перестаёт быть универсальным. Действительно, в следе матрицы $\Lambda(E)$ становится необходимым учитывать второе слагаемое. Кроме того, следует учитывать зависимость коэффициента C_ℓ от энергии, индивидуальную для каждого уровня и каждого ячеечного потенциала.

4. От бесконечной решётки к конечной

Рассмотрим решётку с конечным числом одинаковых ячеек N . Переход от свободного движения (вне решётки) к движению в первой ячейке нашей цепочки и выход из решётки к свободному движению можно описать с помощью "граничных" матриц переноса $\hat{T}_\mp$, сходных с матрицами $\hat{T}$ (5), так что полная матрица переноса на всей решётке из N ячеек имеет вид

$$\hat{T}_g^{\text{tot}} = \hat{T}_- \hat{T}^N \hat{T}_+. \quad (26)$$

Ниже мы подробно обсуждаем решётку со свободными концами, $\hat{T}_\pm = 1$. При других граничных условиях $T_\pm \neq 1$ и выражения для $T_{g,11}^{\text{tot}}(E)$ становятся линейными комбинациями четырёх элементов $T_{ij}^{\text{tot}}(E)$, вычисленных в (28). При $E < 0$ это приводит к сдвигу положения уровней в пределах разрешённой зоны, определённой для бесконечной решётки. Это изменение вполне заметно при небольших N , с увеличением N расстояния между уровнями перестают зависеть от граничных условий. При $E > 0$ подобным образом смещаются и положения точек полной прозрачности (см. ниже), и границы зон непрозрачности.

4.1. Матрица переноса для конечного числа ячеек

Построим по матрице переноса $\hat{T}$ (5) вспомогательную матрицу $\hat{S}(z)$ посредством уравнения с начальным условием $\hat{S}(0) = 1$:

$$\frac{d\hat{S}(z)}{dz} = \hat{T}\hat{S}(z), \quad \hat{S}(z) = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix},$$

или в компонентах

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}.$$

Учитывая определение (8), запишем решение этого уравнения в виде

$$\begin{aligned} \hat{S}(z) &= \exp(\hat{T}z) \equiv R^{-1} \begin{pmatrix} \exp(\lambda_1 z) & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_2 z) \end{pmatrix} \hat{R} \equiv \\ &\equiv \hat{F} \exp(\lambda_1 z) + \hat{G} \exp(\lambda_2 z), \end{aligned}$$

где введены матрицы $\hat{F}$ и $\hat{G}$ с коэффициентами, не зависящими от z , так что, например, $S_{12} = F_{12} \exp(\lambda_1 z) + G_{12} \exp(\lambda_2 z)$. Прямое решение уравнений для отдельных компонент с учётом разложения по экспонентам и начального условия даёт

$$\begin{aligned}
S_{11} &= \frac{(\lambda_1 - T_{22}) \exp(\lambda_1 z) - (\lambda_2 - T_{22}) \exp(\lambda_2 z)}{\lambda_1 - \lambda_2}, \\
S_{21} &= T_{21} \frac{\exp(\lambda_1 z) - \exp(\lambda_2 z)}{\lambda_1 - \lambda_2}, \\
S_{12} &= T_{12} \frac{\exp(\lambda_1 z) - \exp(\lambda_2 z)}{\lambda_1 - \lambda_2}, \\
S_{22} &= \frac{(\lambda_1 - T_{11}) \exp(\lambda_1 z) - (\lambda_2 - T_{11}) \exp(\lambda_2 z)}{\lambda_1 - \lambda_2}.
\end{aligned} \quad (27)$$

Отсюда, в частности, получается

$$\begin{aligned}
(\hat{T}^N)_{11} &\equiv \left[\frac{d^N \hat{S}}{dz^N} \right]_{(z=0)} = \frac{(\lambda_1 - T_{22}) \lambda_1^N - (\lambda_2 - T_{22}) \lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2}, \\
(\hat{T}^N)_{12} &\equiv \left[\frac{d^N \hat{S}}{dz^N} \right]_{(z=0)} = T_{12} \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2}.
\end{aligned} \quad (28)$$

4.2. Случай $E < 0$

При $E < 0$ задача состоит в определении энергий стационарных состояний. Условие существования уровня при энергии E сводится к требованию, чтобы решение, убывающее вправо от нашего набора ям ($\exp(-\kappa x)$ при $x > Na$), после перехода через всю цепочку не содержало вклада, неограниченно возрастающего влево (такой же по форме функции $\exp(-\kappa x)$ при $x < 0$):

$$\hat{T}_{11}^{\text{tot}}(E) \equiv \left[\left(\hat{T}(E) \right)^N \right]_{11} = 0 \quad (\text{уровень при } E < 0). \quad (29)$$

Эта величина вычислена в (28). Подставляя в (29) выражения $\lambda_i = \exp(\pm iqa)$ и учитывая (7), (10), приведём (29) к виду:

$$(\hat{T}^N)_{11} = \frac{\sin[(N+1)qa] - T_{22} \sin(Nqa)}{\sin(qa)} = 0, \quad (30)$$

$$\text{где } 2 \cos(qa) = T_{11} + T_{22}.$$

Это уравнение N -й степени для величины $\cos(qa)$. До конкретизации вида элементов матрицы переноса оно даёт лишь принципиальное решение задачи. Тем не менее можно сказать, что в каждой разрешённой зоне $\mathcal{T}_p$ уравнение (30) имеет, вообще говоря, N решений, отвечающих расщеплению исходного уровня уединённой ямы на "дочерние" уровни набора ям. Мы приходим к важному выводу: *число состояний в зоне совпадает с числом элементов периодичности N* .

Если одна из границ зоны $\mathcal{T}_p$ отвечает положительной энергии, то число "дочерних" уровней с $E < 0$ может оказаться меньше N — говорят, что некоторые из N "дочерних" уровней выталкиваются в область положительных энергий.

В частности, в случае сильной связи величина T_{22} пренебрежимо мала, $T \equiv \theta\sqrt{D}$, и уравнение для уровней энергии (30) упрощается, принимая следующий вид: $\sin[(N+1)qa]/\sin(qa) = 0$. Соответствующие значения квазиимпульса образуют дискретный набор:

$$qa = \frac{m\pi}{N+1}, \quad |m| \leq \frac{N}{2}. \quad (31)$$

Энергии уровней выражаются через ширину зоны $2\Delta\varepsilon$ прямой подстановкой в закон дисперсии получившихся значений qa :

$$E_{mk} = E_k + \Delta\varepsilon_k \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right). \quad (32)$$

Эти значения при $N = 2$ и 3 совпадают с теми, которые получаются в стандартных упражнениях по поиску состояний для двух или трёх δ -ям или для симметричной двойной ямы в квазиклассическом приближении.

При нечётном N уравнение (32) для $d = (N+1)/2$ даёт $E_d = E_k$. Учёт отброшенного слагаемого $T_{22} \equiv \theta\sqrt{D}$ даёт отклонение $E_d - E_k \propto D$ (следующего порядка малости). Для случая трёх δ -ям этот вывод получается простым вычислением.

4.3. Случай $E > 0$

При $E > 0$ мы имеем дело с проблемой рассеяния. В этом случае удобно считать, что каждая ячейка начинается хотя бы ничтожно малым участком свободного движения с $U = 0$, так что можно выбрать решения, начиная при $0 < x < \varepsilon$ с форм $\phi_{1,2} = \exp(\pm ikx)$ (предел $\varepsilon \rightarrow 0$ подразумевается).

Задача состоит в понимании основных черт энергетической зависимости коэффициента прохождения (и отражения). Как обычно, при $x > Na$ мы рассматриваем волну, падающую слева направо (ϕ_1), и отражённую волну (ϕ_2), а при $x < 0$ — прошедшую волну ϕ_1 , т.е. для задачи рассеяния соотношение (9) принимает вид (индексы ℓ и r описывают состояния при $x < 0$ и при $x > Na$ соответственно)

$$\hat{T}^{\text{tot}} \begin{pmatrix} c_{1\ell} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{1r} \\ c_{2r} \end{pmatrix}.$$

Нормируя поток на волну ϕ_1 справа, мы обнаруживаем, что $1/T_{11}^{\text{tot}}(E)$ имеет смысл коэффициента прохождения через цепочку при данной энергии E , а $T_{12}^{\text{tot}}(E)/T_{11}^{\text{tot}}(E)$ — коэффициента отражения. Поэтому при отдельных значениях $E > 0$ реализуются разные физические картины:

$T_{12}^{\text{tot}}(E) = 0$ — полная прозрачность решётки, зона $\mathcal{T}_p$,

$|T_{11}^{\text{tot}}(E)| \gg 1$ — почти полная непрозрачность, зона $\mathcal{S}_p$.

Согласно (28)

$$(\hat{T}^N)_{12} = T_{12} \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2}. \quad (34)$$

Итак, полная прозрачность достигается при $\lambda_2^N = \lambda_1^N$, т.е. при $|A(E)| \leq 1$ — в разрешённой зоне $\mathcal{T}_p$. Поскольку $\lambda_1 \lambda_2 = 1$, это означает $\lambda_2^N = \lambda_1^N = \pm 1$, т.е. полная прозрачность достигается при значениях квазиимпульса $q = \pi r/N$, отвечающих целому числу полуволин на всей цепочке. Иными словами, в каждой зоне $\mathcal{T}_p$ появляется N точек полной прозрачности, между ними коэффициент прохождения близок к 1, при $N \rightarrow \infty$ эти точки сливаются в полосу полной прозрачности в пределах зоны $\mathcal{T}_p$.

Точно так же в соответствии с (28) коэффициент прохождения $1/|T_{11}^{\text{tot}}(E)|$ при $|A(E)| > 1$, т.е. в зоне $\mathcal{S}_p$ убывает с возрастанием N как $\exp(-\beta a N)$, обеспечивая непрохождение электрона при достаточно больших N (запрещённая зона). Следует, однако, заметить, что при больших энергиях отличие β от 0 невелико (21) и заметное подавление прохождения обеспечивается только при очень большом числе в точности одинаковых ячеек $N > 1/\beta$.

Численный пример. В модели с ячейкой — прямоугольной ямой (45) с расстоянием до следующей ямы $a - b = b$, имеющей глубину $V = 1$ эВ, — при $E = 10$ эВ и $ka \approx 10\pi$ получается $\mu \approx 0,02$, т.е. для подавления про-

значности вдвое в центре запрещённой зоны согласно (21) необходимо не менее $N = 50$ ям-ячеек, на середине расстояния от центра до края зоны для такого же подавления потребуется более $N = 70$ тождественных ям-ячеек.

В преподавании эти выводы полезно проиллюстрировать простыми вычислениями и демонстрациями. Анализ рассеяния над прямоугольной ямой, доступный для аудиторных вычислений, показывает, что коэффициент прохождения возрастает с увеличением энергии, достигая единицы при некотором значении E , затем убывает (обычно не очень сильно), снова достигает единицы при другом значении E и далее осциллирует со всё меньшей амплитудой, регулярно проходя через единицу. Для рассеяния над $N = 2 - 15$ ячейками картину удобнее наблюдать уже с помощью программного пакета QUANTX [10]. Можно обнаружить, что каждый из первоначальных максимумов порождает набор близко расположенных N энергий полной прозрачности (коэффициент прохождения равен 1), сменяющихся зонами всё меньшей прозрачности, приобретающими с возрастанием N всё более прямоугольную форму с "дном", близким к нулю. Энергетическая ширина зон малой прозрачности с возрастанием E убывает. При больших энергиях коэффициент прохождения неотличим от 1 для всех E , за исключением узких запрещённых зон.

5. Некоторые следствия нарушения периодичности

Малые хаотические нарушения.

При $E < 0$ образование зон происходит через обобществление состояний множества одинаковых ям, составляющих решётку, как обсуждалось в разделе 3.5.

Рассмотрим сначала уединённую яму произвольной формы, отвечающую одной ячейке решётки. Пусть в ней существуют уровни энергии (сверху вниз): $-E_1, -E_2, \dots, -E_k$ (в реальных кристаллах это электронные уровни энергии в ионах, в типичном случае энергия E_1 порядка 1 эВ, энергии E_2, E_3 и последующие составляют несколько десятков или сотен электронвольт). Каждый из этих уровней порождает разрешённую энергетическую зону. Состояния в каждой из этих зон не локализованы вблизи одной из ям, а распределены между всеми ямами.

Для верхней из зон с $E < 0$ "родительские" состояния отдельных электронов отвечают наибольшему значению квантового числа n , а поле ядра экранируется остальными электронами, так что эффективный заряд ядра $Z = 1$. При этом размер области локализации отдельного "родительского" иона сравним с расстоянием до "соседей". Поэтому коэффициент туннелирования не слишком мал и верхние из разрешённых зон при $E < 0$ относительно широкие.

Для более глубоких зон "родительские" состояния уединённых электронов отвечают меньшим значениям квантового числа n , чем для верхнего уровня, а эффективный заряд ядра больше 1 (меньше электронов участвует в экранировании). Поэтому эффективные размеры ионов уменьшаются, расстояние туннелирования приближается к максимально возможному значению — расстоянию между ионами (параметру решётки) a . Для этих уровней увеличивается по величине и второй множитель под интегралом коэффициента туннелирования. В большей части классически запрещённой области, определяющей коэффициент туннелирования, $|E_k| \gg |V|$, поэтому (48) даёт

$D_k \approx \exp(-a\sqrt{2m|E_k|}/\hbar)$. Значит, коэффициент туннелирования для k -й зоны D_k очень мал, так что набор разрешённых энергий глубоко расположенных зон практически не отличается от N -кратно тиражированного набора энергий уровней изолированных ионов.

Численный пример. Для Al и Cu объём одного грамматомы $\sim 10 \text{ см}^3$. Поэтому среднее межатомное расстояние в таком кристалле составляет $2,5 \times 10^{-8} \text{ см}$. Для энергии $E_k \approx -10 \text{ эВ}$ величина $\hbar/\sqrt{2m|E_k|} \approx 0,6 \times 10^{-8} \text{ см}$. Для такой энергии уровня $D_k \approx e^{-8} \approx 0,0003$, что даёт очень малую ширину зоны, $\Delta E_k \approx 0,003 \text{ эВ}$. При переходе к более глубокому уровню с энергией -100 эВ ширина зоны составит ничтожно малую величину: $\Delta E_k \sim 10^{-9} \text{ эВ}$.

В реальном кристалле периодичность решётки немного нарушена тепловыми колебаниями (существенную роль могут играть и дислокации, и примеси). Из-за этого уровни энергии электронов в соседних квазиуединённых ионах немного различаются. В соответствии с обсуждением в приложении А для пары ям, до тех пор пока такое различие δE_i^0 невелико, обобществление уровней в зону лишь немного отличается от того, что происходит в идеальной решётке. Когда ожидаемая ширина зоны (25) становится меньше δE_i^0 , обобществления уровней не происходит, глубоко сидящие электроны локализуются около своих ионов.

Итак, в кристалле глубоко лежащие состояния локализуются вблизи "своих" ионов, а верхние состояния обобществляются в энергетические зоны с электронами, свободно распространяющимися по решётке.

При $E > 0$ мы имеем дело с резонансами на периодической структуре (как при дифракции на решётке или в интерферометре Фабри–Перо). Как мы видели, в идеальном кристалле для некоторых частот деструктивная интерференция при многократных отражениях и преломлениях делает такой резонатор непрозрачным. В итоге узкие запрещённые зоны возникают и при больших положительных энергиях. На первый взгляд, это нарушает принцип соответствия — при больших энергиях картина должна совпадать с классической, неровности потенциала не должны быть заметны. Здесь опять спасают дело отклонения от идеальной периодичности. Как мы отметили в разделе 4.2, заметное подавление прозрачности может происходить только на большом числе ячеек при соблюдении квазирезонансных условий $k = \pi r/a$.

Небольшие хаотические отклонения от периодичности за счёт теплового движения, дислокаций (даже на соседних линейных цепях) и (или) погрешностей изготовления кристалла "смазывают" деструктивную интерференцию, и значимого накопления непрозрачности не происходит.

При больших значениях E в реальных веществах возникает ещё один механизм нарушения периодичности. Для электронов с большой энергией становится неприменимым приближение фиксированного ячеечного потенциала (1). Взаимодействие электрона с ионом решётки может возбудить или даже разрушить ион. При умеренных энергиях это маловероятный процесс, однако его роль с увеличением энергии возрастает.

6. Заключение. Возможные продолжения

С единой точки зрения изучена структура уровней (разрешённых и запрещённых зон энергии) и областей прозрачности и непрозрачности в одномерных повто-

ряющихся структурах (ячейках) с переходом от конечного набора ячеек к бесконечному — к периодической структуре типа одномерного кристалла. Возникновение зонной структуры является общим свойством таких систем при произвольном виде ячеечного потенциала. Уровни цепочки с конечным числом ячеек лежат внутри зон, определённых для бесконечного кристалла.

В полученных решениях для идеальных решёток имеют место два явления:

1) запрещённые зоны (зоны непрозрачности) не исчезают при сколь угодно большой энергии электрона;

2) электроны, принадлежащие внутренним уровням иона в кристалле, должны принадлежать энергетическим зонам, т.е. обобществляться, а не локализоваться вблизи ионов, как это имеет место в действительности.

Указанные явления не наблюдаются в природе. Последнее означает, что для описания реальности модель идеальной периодической решётки должна быть дополнена. Таким дополнением может служить учёт небольших случайных отклонений от периодичности (тепловое движение, дислокации, примеси, возбуждения ионов решётки) (см. раздел 5).

Помимо общих результатов, приведённые в разделах 2 и 4 формулы дают возможность реализации обычных не выполняемых исследований.

• В случае, когда ячеечный потенциал известен, можно решить уравнение Шрёдингера на ячейке численно. По этим решениям вычисляются закон дисперсии и положения уровней для конечных решёток. Сравнение с результатами наблюдений позволит оценить качество имеющегося описания ячеечного потенциала.

• Представляет интерес конструирование решётки с предпочтительным для каких-либо задач видом закона дисперсии, например, таким, для которого зависимость $E(q)$ содержит точку перегиба $\partial E/\partial q = 0$ при $0 \leq q\pi/a$ (что приведёт к особенностям в распределении числа состояний по энергии). В соответствии с изложенным в разделе 2 для этого достаточно исследовать решения уравнения Шрёдингера на единственной ячейке.

Автор благодарен А. Ефанову, Г. Коткину, А. Ненашеву, В. Ткаченко и многочисленным студентам за полезные обсуждения. Работа поддержана программой фундаментальных научных исследований СО РАН П.15.1, проект № 0314-2019-00, и грантом проекта HARMONIA (Польша), контракт UMO-2015/18/M/ST2/00518 (2016–2019).

7. Приложения

А. Слегка несимметричная двойная яма

Основу для многих физических обсуждений даёт случай, в котором потенциал сводится к паре ям, разделённых областью $U_i = 0$. В классической задаче состояния частиц в каждой из ям независимы, они "не знают" друг о друге. В квантовом случае "крылья" волновых функций каждой из ям достигают другой ямы, происходит туннелирование между ямами. Поскольку волновая функция вне ямы довольно быстро убывает, обычно туннелирование — слабый эффект, лишь немного изменяющий уровни энергии и волновые функции. Однако в случае, когда энергии уровней в обеих уединённых ямах совпадают, туннелирование может привести к "перекачке" состояний между двумя ямами, что и является причиной образования зонной структуры при увеличении числа ям.

Основные черты решения этой задачи удобно изучать на примере системы с

$$U(x) = -G_1\delta(x+a) - G_2\delta(x-a). \quad (35)$$

Напомним, что для потенциала $U(x) = -G\delta(x-b)$ правила сшивания для волновой функции можно представить в виде

$$\psi'(b+0) - \psi'(b-0) = -2g_0\psi(b), \quad (36)$$

$$\psi(b+0) = \psi(b-0), \quad g_0 = \frac{mG}{\hbar^2}.$$

Эта система имеет одно связанное состояние с энергией E_0 и волновой функцией ψ_1 ,

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 g_0^2}{2m}, \quad \psi_1(x) = \sqrt{g_0} \exp(-g_0|x|). \quad (37)$$

Для пары ям при произвольной энергии $E = -\hbar^2 \kappa^2/(2m)$ последовательное применение правил сшивания (36) в точках $x = \pm a$ даёт уравнение для определения уровней:

$$\begin{aligned} \kappa^2 - (g_{0,1} + g_{0,2})\kappa + g_{0,1}g_{0,2}(1 - D_a) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \kappa &= \frac{g_{0,1} + g_{0,2} \pm \sqrt{(g_{0,1} - g_{0,2})^2 + 4g_{0,1}g_{0,2}D_a}}{2}, \end{aligned} \quad (38)$$

где $g_{0,i} = mG_i/\hbar^2$, $D_a = \exp(-4\kappa a)$.

Мы рассмотрим случай $D_a \ll 1$.

• *Симметричная система*, $G_1 = G_2 = G$.

Из (38) видно, что первоначальный уровень (37) расщепляется на два уровня с энергиями

$$E_{\pm} = E_0 \pm \Delta_S, \quad \Delta_S = 2\sqrt{D_a} E_0 \ll E_0. \quad (39)$$

Подстановка полученных решений в волновые функции показывает, что для наименьшей энергии $E = E_0 - \Delta_S$ волновая функция симметрична, т.е. $\psi_{0r}(x) = \psi_{0l}(-x)$, а для энергии $E = E_0 + \Delta_S$ волновая функция антисимметрична, т.е. $\psi_{0r}(x) = -\psi_{0l}(-x)$. При малых значениях D волновые функции в каждой из "половинок" ямы мало отличаются от волновой функции уединённой ямы $\psi_0(x)$.

Если в начальный момент времени частица располагалась в окрестности правой ямы ($\psi(x, t=0) = \psi_{0r}(x)$), то через время $\pi\hbar/\Delta_S$ она окажется в левой яме, т.е. волновая функция осциллирует,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) \left[\psi_0(x) \cos \frac{t}{\tau} + i\psi_0(-x) \sin \frac{t}{\tau} \right], \\ \tau &= \frac{\hbar}{\Delta_S}. \end{aligned}$$

• *Небольшое отклонение от симметрии* $|G_1 - G_2| \ll G_1$. Удобно ввести обозначения:

$$g_0 = \frac{g_{0,1} + g_{0,2}}{2} \Rightarrow E_0 = -\frac{\hbar^2 g_0^2}{2m}, \quad \delta g_0 = g_{0,1} - g_{0,2},$$

так что энергии уединённых ям составляют

$$E_{0l} = E_0 - \delta, \quad E_{0r} = E_0 + \delta, \quad \delta = \frac{\hbar^2 g_0 \delta g_0}{m} \ll E_0. \quad (40)$$

Прямая подстановка в решение (38) даёт энергии уровней в виде

$$E_{\pm} = E_0 + \Delta, \quad \Delta = \pm \sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}. \quad (41)$$

Отсюда видно, что при $\Delta_S < \delta$ туннелирование почти не изменяет уровней. Наоборот, при $\Delta_S > \delta$ расщепление термов близко к тому, которое было в симметричном случае (система забывает об исходной малой асимметрии). Прямое вычисление волновой функции в указанных предельных случаях показывает следующее.

- При $\Delta_S \gg \delta$ расщепление исходных термов δ существенно по сравнению с эффектом туннелирования, смешивающего состояния. При $\Delta < 0$ волновая функция симметрична (волновая функция основного состояния не имеет нулей), а при $\Delta > 0$ волновая функция антисимметрична, — как и в случае, когда расщепление исходных термов δ отсутствует. Для стационарных состояний вероятности пребывания в левой и правой ямах одинаковы, как и в случае симметричной ямы. Если сосредоточить начальное состояние вблизи одной из ям, то с течением времени оно перетечёт в другую, возникнут биения с частотой $\tau = 2\hbar/\Delta_S$. Можно сказать, что система почти "не замечает" первоначального расщепления уровней.

- При $\delta \gg \Delta_S$ состояния с высокой точностью остаются локализованными справа или слева, туннелирование почти не изменяет состояний, биений не возникает. Нетрудно убедиться в том, что при $\Delta > 0$ система локализуется в правой яме, вероятность найти её в левой яме очень мала. Точно так же для состояния с $\Delta < 0$ легко получается $w_r/w_l \approx (2\delta/\Delta_S)^2 \gg 1$, т.е. система локализуется в правой яме, вероятность найти её в левой яме очень мала. Можно сказать, что система "не замечает" туннелирования, обобществления состояний не происходит.

Не составляет большого труда получить подобные выводы и для пары гладких ям с помощью квазиклассического приближения (см., например, [4]).

Б. Коллекция точно решаемых моделей

Б.1. "Забор" из δ -ям (модель Кронига–Пенни)

$$U(x) = -G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na - \varepsilon), \quad k_0 = \frac{mG}{\hbar^2} > 0. \quad (42)$$

Здесь ε — малая вспомогательная величина, указывающая, что граница между ячейками расположена там, где потенциал гладкий, так что можно использовать правила сшивания в виде (4). В результате мы устремляем $\varepsilon \rightarrow 0$.

При $E < 0$ выберем $\phi_1(x, E) = \exp(\kappa x)$ и $\phi_2(x, E) = \exp(-\kappa x)$. Простое применение условий сшивания на δ -яме позволяет получить коэффициенты $c_1^{(2)}$ и $c_2^{(2)}$ с другой стороны ямы, а к концу ячейки, в точке $x = a - 0$, эти коэффициенты приобретают дополнительные множители $\exp(\kappa a) = 1/\sqrt{D}$ в левом столбце или $\exp(-\kappa a) = \sqrt{D}$ в правом. (Величина $D = \exp(-2\kappa a)$ представляет собой коэффициент туннелирования между соседними ямами.) Получившаяся матрица переноса имеет вид

$$T = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{k_0}{\kappa}\right) \frac{1}{\sqrt{D}} & -\frac{k_0}{\kappa} \sqrt{D} \\ \frac{k_0}{\kappa \sqrt{D}} & \left(1 + \frac{k_0}{\kappa}\right) \sqrt{D} \end{pmatrix}, \quad D = D_A \equiv \exp(-2\kappa a). \quad (43)$$

Случай положительной энергии, $E > 0$, получается отсюда простой заменой: $\kappa \rightarrow i k \equiv i(2mE/\hbar^2)^{1/2}$ и $X = \kappa a \rightarrow Y = ka$.

Выражение для следа матрицы переноса принимает вид

$$A(E) = \begin{cases} \cosh(\kappa a) - \frac{k_0}{\kappa} \sinh(\kappa a) & \text{при } E < 0, \quad (44a) \\ \cos(ka) - \mu_A \sin(ka), \quad \mu_A = \frac{k_0}{k} & \text{при } E > 0. \quad (44b) \end{cases}$$

При $|A(E)| \leq 1$ эти соотношения обращаются в закон дисперсии (10), $\cos(qa) = A(E)$.

Детальное исследование решений этих уравнений содержится, например, в [1–4]. Заметим, что уравнение (44) по виду совпадает с (20) (различие состоит в определении параметра μ_A). Поэтому и результаты, на первый взгляд, совпадают с соответствующими результатами приближения слабой связи. Однако, в отличие от ширины запрещённых зон в общем случае, рассмотренном в разделе 3.4, которые с возрастанием E убывали, для модели Кронига–Пенни эти ширины с возрастанием E не изменяются. Это артефакт модели, обусловленный сингулярностью используемого потенциала ячейки.

Б.2. Ячейка — прямоугольная яма глубиной $-V$ и шириной b , расстояние до следующей ямы $(a - b)$

$$U(x) = \begin{cases} -V & \text{при } na < x < na + b, \\ 0 & \text{при } na + b < x < (n+1)a. \end{cases} \quad (45)$$

Обозначим $k_0 = \sqrt{2mV/\hbar^2}$, а также

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E+V)}{\hbar^2}}, \quad z = k_1 b;$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad Y = k(a-b) \text{ при } E > 0;$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad X = \kappa(a-b) \text{ при } E < 0.$$

Простые, но громоздкие вычисления дают при $E > 0$

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \left(\cos z - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z\right) \exp(-iY) & i \frac{k_0^2}{2kk_1} \sin z \exp(iY) \\ -i \frac{k^2}{2kk_1} \sin z \exp(-iY) & \left(\cos z + i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z\right) \exp(iY) \end{pmatrix}.$$

Случай $E < 0$ получается естественной заменой переменных.

Выражение для следа матрицы переноса принимает вид

$$A(E) = \begin{cases} \cos z \cosh X - \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \sinh X & \text{при } E < 0, \quad (46a) \\ \cos z \cos Y - \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \sin Y & \text{при } E > 0. \quad (46b) \end{cases}$$

При $|A(E)| \leq 1$ эти соотношения обращаются в закон дисперсии (10) $\cos(qa) = A(E)$.

Анализ приближений слабой и сильной связи в этой задаче представляет собой простую конкретизацию результатов раздела 3.

Б.3. Синусоидальное поле

$$U(x) = 2V \cos \frac{2\pi x}{a}. \quad (47)$$

В таком периодическом поле уравнение Шрёдингера сводится к уравнению Матё, решения которого рассматриваются, например, в [11, 14] (и изучаются в курсах механики при описании параметрического резонанса). В некоторых обсуждениях используется тот факт, что в

импульсном представлении уравнение Шрёдингера для этой задачи превращается в разностное [6].

Базовые решения ϕ_1 и ϕ_2 на ячейке для такого поля не выражаются через элементарные функции и обозримое выражение для матрицы переноса автору не известно.

Б.4. Решётка с плавно изменяющимся потенциалом в условиях применимости квазиклассического описания [7, задача 2-11]. При каждом данном значении E удобно за левую границу ячейки принять левую точку поворота, при этом a_0 — правая точка поворота. (Сдвиг начала отсчёта координат при изменении E не вносит серьёзных усложнений.)

Применение квазиклассических правил сшивания в этом случае даёт

$$T = \begin{pmatrix} \frac{2 \cos \sigma}{\sqrt{D}} & -\sqrt{D} \sin \sigma \\ \frac{\sin \sigma}{\sqrt{D}} & \sqrt{D} \cos \sigma \end{pmatrix}, \quad \sigma = \int_0^{a_0} \frac{p(x)}{\hbar} dx, \quad (48)$$

$$D \equiv D_D = \exp \left(-2 \int_{a_0}^a \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} dx \right).$$

Выражение для следа матрицы переноса принимает вид

$$A(E) = \left(\frac{1}{\sqrt{D}} + \frac{\sqrt{D}}{4} \right) \cos \sigma. \quad (49)$$

При $|A(E)| \leq 1$ соотношение (49) обращается в закон дисперсии (10) $\cos(qa) = A(E)$.

В. Свет в слоистой среде. Фотонные кристаллы

Рассмотрим структуру, состоящую из N одинаковых наложенных друг на друга стопок из плоскопараллельных пластинок B , используя стандартные обозначения в гауссовой системе единиц для веществ с $\mu = 1 \Rightarrow n = \sqrt{\epsilon}$ [15].

В.1. Общий случай. Матричная запись. Пусть пространство заполнено слоями вещества $1, 2, \dots, N$ с диэлектрическими проницаемостями $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_N$ так, что границы всех слоёв перпендикулярны оси z , а толщины слоёв составляют $d_2, d_3, \dots$ (слои 1 и N — полубесконечные). Примем для определённости, что ϵ_1 — действительная величина.

Пусть свет частотой ω падает из среды 1 с углом падения $\alpha = \varphi/2$ (см. рисунок) и волновой вектор расположен в плоскости (x, z) . Удобно рассмотреть две возможные линейные поляризации света: случай, когда электрическое поле перпендикулярно плоскости (x, z) — поляризация ТЕ, и случай, когда магнитное поле перпендикулярно плоскости (x, z) — поляризация ТМ. Для определённости на рисунке показан случай ТЕ.

Во всех этих средах свет имеет одну и ту же частоту и одну и ту же компоненту волнового вектора, параллельную границе, $k_x = (\omega/c)\sqrt{\epsilon_1} \sin \alpha$. Компоненты волнового вектора, перпендикулярные границе, во всех слоях различны,

$$k_{iz} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_i - k_x^2}. \quad (50)$$

Они могут быть и действительными (прозрачная среда), и мнимыми (случай полного внутреннего отражения), и комплексными (проводящая среда).

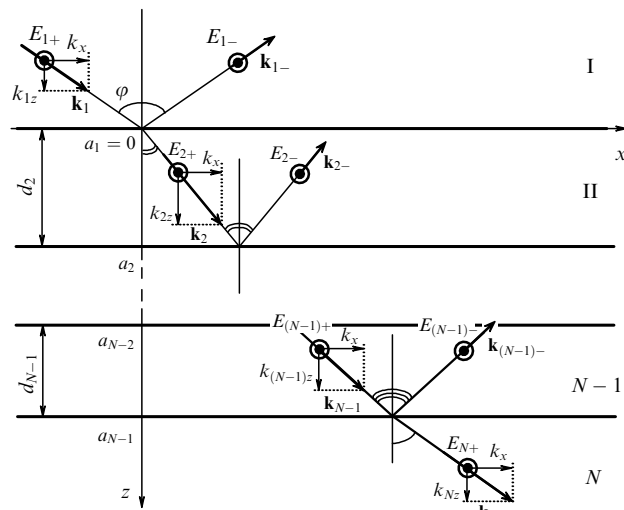


Рисунок. Поля в слоистой среде (случай ТЕ).

Обозначим координаты границ слоёв: $z = a_1 = 0$ — граница между слоями 1 и 2, $z = a_2 = d_2$ — граница между слоями 2 и 3, $z = a_3 = d_2 + d_3$ — граница между слоями 3 и 4, ..., $z = a_{N-1} = d_2 + d_3 + \dots + d_{N-1}$ — граница между слоями $N-1$ и N . При этом, например, $z = a_2 = 0$ обозначает точку среды 2 "над" границей (2, 3), а $z = a_2 + 0$ — точку среды 3 "под" этой границей.

Поле в каждом слое представляет собой сумму волн, уходящих "вниз" (знак +) и "вверх" (знак -),

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_i &= \mathbf{E}_{i+}(a_m) \exp \{ -i[\omega t - k_x x - k_{iz}(z - a_m)] \} + \\ &+ \mathbf{E}_{i-}(a_m) \exp \{ -i[\omega t - k_x x + k_{iz}(z - a_m)] \}, \\ \mathbf{H}_i &= \mathbf{H}_{i+}(a_m) \exp \{ -i[\omega t - k_x x - k_{iz}(z - a_m)] \} + \\ &+ \mathbf{H}_{i-}(a_m) \exp \{ -i[\omega t - k_x x + k_{iz}(z - a_m)] \}. \end{aligned} \quad (51)$$

Идея решения задачи состоит в следующем. Пусть нам известно поле в среде I, т.е. вплоть до "высоты" $a_1 = 0$. С помощью граничных условий отсюда определяется поле в среде II на "высоте" $a_1 + 0$. Далее легко определяется поле в среде II на "высоте" $a_2 = 0$. Затем та же процедура повторяется для перехода в среду III, и мы получаем поле на "высоте" $a_3 = 0$. В конце концов мы приходим к описанию полей в среде N , на "высоте" $a_N + 0$, что и является искомым результатом. Технически указанные преобразования от одного слоя к другому удобно описывать с помощью матриц — как преобразования столбца

$$\begin{pmatrix} E_{1+}(a_1) \\ E_{1-}(a_1) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} E_{1+}(a_N) \\ E_{1-}(a_N) \end{pmatrix}$$

и аналогичного столбца для магнитного поля.

Переход через границу двух сред.

• В ТЕ-волне электрическое поле направлено по оси y , $\mathbf{E} = (0, E, 0)$. Условие непрерывности на границе двух слоёв, например второго и третьего, можно записать как условие для амплитуд полей:

$$E_{2+}(a_2 - 0) + E_{2-}(a_2 - 0) = E_{3+}(a_2 + 0) + E_{3-}(a_2 + 0),$$

$$\begin{aligned} k_{2z}(E_{2+}(a_2 - 0) - E_{2-}(a_2 - 0)) &= \\ &= k_{3z}(E_{3+}(a_2 + 0) - E_{3-}(a_2 + 0)). \end{aligned}$$

Отсюда амплитуды полей в следующем слое выражаются через амплитуды в предыдущем слое посредством соотношений, которые удобно выразить с помощью матрицы переноса⁸ (это матричная запись известных формул Френеля):

$$\begin{pmatrix} E_{3+}(a_2 + 0) \\ E_{3-}(a_2 + 0) \end{pmatrix} = \hat{T}_{32}^{\text{bTE}} \begin{pmatrix} E_{2+}(a_2 - 0) \\ E_{2-}(a_2 - 0) \end{pmatrix}, \quad (52)$$

$$\hat{T}_{32}^{\text{bTE}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r_{23}^{\text{E}} & 1 - r_{23}^{\text{E}} \\ 1 - r_{23}^{\text{E}} & 1 + r_{23}^{\text{E}} \end{pmatrix}, \quad r_{23}^{\text{E}} = \frac{k_{2z}}{k_{3z}}.$$

• В ТМ-волне магнитное поле направлено по оси y , $\mathbf{H} = (0, H, 0)$. Условие непрерывности на границе тех же второго и третьего слоёв можно записать как условие для амплитуд полей:

$$\begin{aligned} H_{2+}(a_2 - 0) + H_{2-}(a_2 - 0) &= H_{3+}(a_2 + 0) + H_{3-}(a_2 + 0), \\ \varepsilon_3 k_{2z} (H_{2+}(a_2 - 0) - H_{2-}(a_2 - 0)) &= \\ &= \varepsilon_2 k_{3z} (H_{3+}(a_2 + 0) - H_{3-}(a_2 + 0)). \end{aligned}$$

Отсюда амплитуды полей в следующем слое выражаются через амплитуды в предыдущем слое с помощью соотношений, которые удобно представить в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} H_{3+}(a_2 + 0) \\ H_{3-}(a_2 + 0) \end{pmatrix} = \hat{T}_{32}^{\text{bTM}} \begin{pmatrix} H_{2+}(a_2 - 0) \\ H_{2-}(a_2 - 0) \end{pmatrix}, \quad (53)$$

$$\hat{T}_{32}^{\text{bTM}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r_{23}^{\text{M}} & 1 - r_{23}^{\text{M}} \\ 1 - r_{23}^{\text{M}} & 1 + r_{23}^{\text{M}} \end{pmatrix}, \quad r_{23}^{\text{M}} = \frac{\varepsilon_3 k_{2z}}{\varepsilon_2 k_{3z}}.$$

Прохождение через слой. Пройдя через слой 3, волны изменяют свои комплексные амплитуды. В матричном виде эта связь (переход к другой границе слоя) для волны ТЕ выражается следующим образом:

$$\begin{pmatrix} E_{3+}(a_3 - 0) \\ E_{3-}(a_3 - 0) \end{pmatrix} = \hat{T}_{\{3\}}^{\text{d}} \begin{pmatrix} E_{3+}(a_2 + 0) \\ E_{3-}(a_2 + 0) \end{pmatrix}, \quad (54)$$

$$\hat{T}_{\{3\}}^{\text{d}} = \begin{pmatrix} \exp(ik_{3z}d_3) & 0 \\ 0 & \exp(-ik_{3z}d_3) \end{pmatrix}.$$

Запись для ТМ-волны выглядит точно так же с заменой $E \rightarrow H$, и матрица $\hat{T}_{\{3\}}^{\text{d}}$ имеет точно такой же вид.

Прохождение через стопку пластинок. Теперь ясно, что для каждой из поляризаций можно записать

$$\begin{pmatrix} E_{N+}(a_N + 0) \\ E_{N-}(a_N + 0) \end{pmatrix} = \hat{T}_{\text{TE}}^{\text{tot}} \begin{pmatrix} E_{1+}(a_1 - 0) \\ E_{1-}(a_1 - 0) \end{pmatrix},$$

$$\hat{T}_{\text{TE}}^{\text{tot}} = \hat{T}_{N,N-1}^{\text{bTE}} \hat{T}_{\{N-1\}}^{\text{d}} \dots \hat{T}_{21}^{\text{bTE}};$$

$$\begin{pmatrix} H_{N+}(a_N + 0) \\ H_{N-}(a_N + 0) \end{pmatrix} = \hat{T}_{\text{TM}}^{\text{tot}} \begin{pmatrix} H_{1+}(a_1 - 0) \\ H_{1-}(a_1 - 0) \end{pmatrix}, \quad (55)$$

$$\hat{T}_{\text{TM}}^{\text{tot}} = \hat{T}_{N,N-1}^{\text{bTM}} \hat{T}_{\{N-1\}}^{\text{d}} \dots \hat{T}_{21}^{\text{bTM}}.$$

Напомним, что определитель произведения матриц равен произведению определителей сомножителей. Нетрудно убедиться в том, что

$$\det \hat{T}_{\{k\}}^{\text{d}} = 1, \quad \det \hat{T}_{k+1,k}^{\text{bTE}} = r_{k+1,k}^{\text{E}}, \quad \det \hat{T}_{k+1,k}^{\text{bTM}} = r_{k+1,k}^{\text{M}}. \quad (56a)$$

Поэтому определитель полной матрицы переноса имеет простой вид:

$$\det \hat{T}_{\text{TE}}^{\text{tot}} = r_{21}^{\text{E}} r_{32}^{\text{E}} \dots r_{N,N-1}^{\text{E}} = \frac{k_{zN}}{k_{z1}},$$

$$\det \hat{T}_{\text{TM}}^{\text{tot}} = r_{21}^{\text{M}} r_{32}^{\text{M}} \dots r_{N,N-1}^{\text{M}} = \frac{\varepsilon_1 k_{zN}}{\varepsilon_N k_{z1}}. \quad (56b)$$

В частности, если стопка пластинок $\mathbf{B}$ начинается и кончается в одной и той же среде, то для неё $\det \hat{T}_{\mathbf{B}} = 1$.

Простейшая стопка $\mathbf{B}$ состоит из пары пластинок: пластинки шириной d_2 с диэлектрической проницаемостью ε_2 и пластинки шириной d_1 с диэлектрической проницаемостью ε_1 . Для этой стопки матрица переноса имеет вид $\hat{T}_{\mathbf{B}} = \hat{T}_{21}^{\text{b}} \hat{T}_{\{2\}}^{\text{d}} \hat{T}_{12}^{\text{b}} \hat{T}_{(1)}^{\text{d}}$. Подставляя выражения (52)–(54), после простых вычислений найдём выражение для определителя и следа матрицы переноса⁹

$$\det \hat{T}_{\mathbf{B}} = 1,$$

$$2\mathcal{A} \equiv \text{Tr}(\hat{T}_{\mathbf{B}}) = 2 \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 - \left(r + \frac{1}{r}\right) \sin \alpha_1 \sin \alpha_2,$$

$$k_{zj} d_j = \alpha_j, \quad r_{\text{TE}} = \frac{k_{2z}}{k_{1z}}, \quad r_{\text{TM}} = \frac{\varepsilon_1 k_{2z}}{\varepsilon_2 k_{1z}}. \quad (57)$$

Для прозрачных сред величина $\mathcal{A}$ действительна. Чтобы убедиться в этом, напомним, что, до тех пор пока угол падения не превышает угла полного внутреннего отражения при переходе из среды I в среду II, все входящие в (57) величины действительны. Если угол падения превышает угол полного внутреннего отражения при переходе из среды I в среду II, то величина k_{2z} становится мнимой, $k_{2z} = i\kappa$. Вследствие этого мнимой оказывается и величина r . Точно так же мнимой становится и фаза величины $\alpha_2 = i\kappa d_2 \equiv i\gamma$. При этом происходит очевидная замена $\cos \alpha_2 \rightarrow \cosh \gamma$, $\sin \alpha_2 \rightarrow i \sinh \gamma$. При такой замене действительность величины $\mathcal{A}$ восстанавливается¹⁰.

Таким образом, стопка $\mathbf{B}$ — аналог ячейки кристаллической решётки, изучавшейся в предыдущих разделах, и матрица переноса $\hat{T}_{\mathbf{B}}$ обладает теми же свойствами, что и общая матрица переноса для линейной квантовой цепочки (5) с тем же уравнением на собственные значения.

В.2. Большие стопки одинаковых пластинок. Рассмотрим теперь структуру, состоящую из N одинаковых наложенных друг на друга стопок пластинок $\mathbf{B}$. Получающиеся для этой структуры результаты во многом подобны тем, которые обсуждались в разделе 4, существенное различие связано с различием в числе элементов периодичности — для кристалла $N = 10^4 - 10^8$, для рассматриваемой оптической структуры вряд ли можно иметь $N \gtrsim 10^2$.

⁹ Обратим внимание на сходство с матрицей переноса для модели Б.2 (46).

¹⁰ Полученные формулы позволяют с единой точки зрения рассмотреть ряд традиционных задач оптики для плоскопараллельной пластинки в разнообразных случаях: простая пластинка, включая случай, когда на её толщине укладывается целое число полуволн (голубая оптика), случай диэлектрического зеркала, пластинка в случае полного внутреннего отражения, тонкая металлическая пластинка [15].

⁸ Смысл индексов у матриц: в (52) в верхнем индексе b — переход границы (boundary), TE — тип волны; в нижнем индексе 32 — переход в среду 3 из среды 2; в (54) в верхнем индексе d — сдвиг на величину d , в нижнем индексе — номер слоя.

Покажем на нескольких примерах, что для различных параметров наших стоек, углов падения и частот света можно реализовать обе возможности, $|A| > 1$ и $|A| < 1$.

Прежде всего, если пластинки достаточно тонкие, т.е. $\alpha_1 \ll 1$ и $\alpha_2 \ll 1$, то в выражении (57) первое слагаемое немного меньше 2, а второе также невелико, так что $1 > |A| > 0$, наша структура прозрачна, выполняется необходимое условие существования разрешённой зоны: стопка из большого числа таких пластинок может быть абсолютно прозрачной.

Более интересны случаи не очень тонких пластинок. Мы обсудим здесь только случай действительных k_{iz} (и соответственно r).

Если в одной из пластинок укладывается целое число полуволин, т.е. $\alpha_1 = m\pi$ или $\alpha_2 = m\pi$, то $|A| \leq 1$, реализуется условие существования разрешённой зоны — стопка из большого числа таких пластинок может быть абсолютно прозрачной.

Если, наоборот, в одной из пластинок укладывается нечётное число четвертей длины волны, т.е., например, $\alpha_1 = (m + 1/2)\pi$, то, поскольку $(r + 1/r) > 2$, в широком интервале значений α_2 оказывается $|A| \geq 2$, т.е. реализуется условие существования запрещённой зоны: стопка из большого числа таких пластинок непрозрачна.

Функция A — гладкая функция своих аргументов. Поэтому условия существования разрешённой и запрещённой зон реализуются в некоторой более или менее широкой области частот и (или) углов падения. Подчеркнём, что для ТЕ- и ТМ-волн разрешённые и запрещённые зоны различаются.

Таким образом, в рассматриваемой системе появляются наборы разрешённых и запрещённых зон — в точности так же, как для электрона в кристалле. Такой объект интерпретируется как *фотонный кристалл* (см., например, [9]). Удобное преимущество фотонного кристалла перед полупроводниковым состоит в том, что в оптическом случае управлять разными возможностями можно, меняя, помимо элементов периодичности — материала и толщины пластин, не один параметр, а два: частоту света и угол его падения.

Экзотические возможности открываются, когда:

а) один из слоёв в стопке В — тонкая металлическая пластинка;

б) на границе двух сред происходило бы полное внутреннее отражение, т.е., например, k_{2z} — чисто мнимая величина.

Список литературы

1. Елютин П В, Кривченко В Д *Квантовая механика с задачами* (М.: Физматлит, 2001)
2. Сербо В Г, Хриплович И Б *Квантовая механика* (Новосибирск: Новосибирский гос. ун-т, 2008)
3. Zelevinsky V *Quantum Physics* (Weinheim: Wiley-VCH, 2011); Пер. на русск. яз.: Зелевинский В Г *Квантовая физика* Т. 1–3 (Новосибирск: РИЦ НГУ, 2014, 2015)
4. Гинзбург И Ф *Основы квантовой механики (нерелятивистская теория)* (М.–Ижевск: Ин-т компьютер. иссл., 2018)
5. Flüge S *Practical Quantum Mechanics* (New York: Springer-Verlag, 1974); Пер. на русск. яз.: Флюге С *Задачи по квантовой механике* Т. 1 (М.: Мир, 1974)
6. Гольдман И И, Кривченко В Д *Сборник задач по квантовой механике* (М.: УНЦ ДО, 2001); Пер. на англ. яз.: Gold'man I I, Krivchenkov V D *Problems in Quantum Mechanics* (Mineola, NY: Dover Publ., 2006)
7. Галицкий В М, Карнаков Б М, Коган В И *Задачи по квантовой механике* (М.: Едиториал УРСС, 2001); Пер. на англ. яз.: Galitski V, Karnakov B, Kogan V *Exploring Quantum Mechanics: a Collection of 700+ Solved Problems for Students, Lecturers, and Researchers* (Oxford: Oxford Univ. Press, 2013)
8. Jones H *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals* (Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1960); Пер. на русск. яз.: Джонс Г *Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах* (М.: Мир, 1968)
9. Белотелов В И, Звездин А К *Фотонные кристаллы и другие метаматериалы* (Приложение к журналу "Квант", № 2) (М.: Бюро Квантум, 2006)
10. Коткин Г Л, Ткаченко О А, Ткаченко В А *Компьютерный практикум по квантовой механике* (Новосибирск: Новосибирский гос. ун-т, 1996); *Электронный практикум по квантовой механике* (Новосибирск: Новосибирский гос. ун-т, 2012); <https://sourceforge.net/projects/quantx/>
11. Брагинский Л С и др. *Сборник задач по теории твердого тела* (Новосибирск: Новосибирский гос. ун-т, 2013)
12. Игнатович В К *УФН* **150** 145 (1986); Ignatovich V K *Sov. Phys. Usp.* **29** 880 (1986)
13. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика: нерелятивистская теория* (М.: Физматлит, 2004); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press, 1977)
14. Davison S G, Levine J D "Surface states", in *Solid State Physics* Vol. 25 (Eds H Ehrenreich, F Seitz, D Turnbull) (New York: Academic Press, 1970); Пер. на русск. яз.: Дэвисон С, Левин Дж *Поверхностные (таммовские) состояния* (М.: Мир, 1973)
15. Гинзбург И Ф, Погосов А Г *Электродинамика. Релятивистское описание. Волновые явления* (Новосибирск: Новосибирский гос. ун-т, 2010)

Particles in finite and infinite one-dimensional chains

I.F. Ginzburg

Sobolev Institute for Mathematics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences,
prosp. Akademika Koptyuga 4, 630090 Novosibirsk, Russian Federation;
Novosibirsk State University, ul. Pirogova 2, 630090 Novosibirsk, Russian Federation
E-mail: ginzburg@math.nsc.ru

Particle motion in one-dimensional crystal chain is studied with the help of the transfer matrix method. The transition from a finite to an infinite chain is analyzed. In cases where an analytical solution is impossible, the method allows the computation of energy spectra with acceptable accuracy, based on the known cell potential. It turns out that the structure of allowed and forbidden energy bands arising in an ideal lattice contains some features that are absent in the real world. This means that the model of an ideal lattice should be extended in order to describe reality. It is shown that accounting for small random perturbations of periodicity may serve as such an extension. Light propagation in a layered medium (including a photonic crystal) is studied using the same method.

Keywords: periodic lattice, finite lattice, transfer matrix, random perturbations, strong coupling and weak coupling approximations

PACS numbers: **03.65. – w**, **71.15. – m**, **42.70.Qs**

Bibliography — 15 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **190** (4) 429 – 440 (2020)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2019.12.038709>

Received 23 April 2019, revised 25 October 2019

Physics – Uspekhi **63** (4) (2020)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2019.12.038709>