П.Э. Пяк, А.В. Хугаев, А.Р. Малышева

Одномерное движение частицы в поле периодического потенциала с барьерами разной высоты

Аннотация. *Рассматривается энергетический спектр электрона в одномерной периодической решётке, потенциал которой задаётся чередованием прямоугольных барьеров высот U_1 и U_2 $(U_2 \geq U_1)$. В отличие от классической модели Кронига–Пенни, такая конфигурация описывает неоднородности, вызванные примесями, точечными дефектами и неоднородным химическим составом кристалла. Прямая сшивка волновых функций на границах барьеров приводит к дисперсионному соотношению, однако в пределе $U_1 \to U_2$ получаемый спектр не совпадает с каноническим результатом модели Кронига–Пенни. Для устранения этого несоответствия предложен альтернативный метод: потенциал представляется как суперпозиция двух стандартных задач Кронига–Пенни с постоянными высотами U_1 и U_2, а перенос волновой функции через период описывается произведением соответствующих матриц перехода. Полученное аналитическое дисперсионное уравнение позволяет явно выделять разрешённые и запрещённые зоны и количественно оценивать влияние локальных вариаций потенциала на электронные свойства. Разработанный подход применим к расчёту зонных структур примесных цепочек, проектированию полупроводниковых и наноструктурных устройств, а также к описанию периодических систем с управляемыми электронными характеристиками.*

Ключевые слова. *Одномерный периодический потенциал; модель Кронига-Пенни; прямоугольный барьер; примесные структуры; суперкристаллы; зонная структура; разрешённые и запрещённые зоны; функция Блоха; матрица перехода; туннельный эффект.*

Введение. В статье рассматривается электрон с эффективной массой μ, движущийся в одномерном периодическом потенциале, образованном чередованием прямоугольных барьеров высот U_1 и U_2 $(U_2 \geq U_1)$. Ширина каждого барьера составляет $2a$, а промежуточных областей с нулевым потенциалом – $2b$. Структура «$U_1 -$ яма $- U_2 -$ яма» задаёт пространственный период:

$$L = 4a + 4b$$

Система координат выбрана так, что $x = 0$ приходится на середину барьера высоты U_1 (Рис.1). Предлагаемая модель расширяет классическую задачу Кронига–Пенни, позволяя учесть неоднородность кристалла. Барьеры U_1 описывают основной периодический компонент кристаллического потенциала, тогда как барьеры U_2 моделируют локальные возмущения, связанные с примесями или точечными дефектами. Анализ такой структуры даёт возможность проследить, как изменение высот барьеров влияет на зонную структуру твёрдого тела, что принципиально важно при проектировании и оптимизации полупроводниковых и наноструктурных систем.

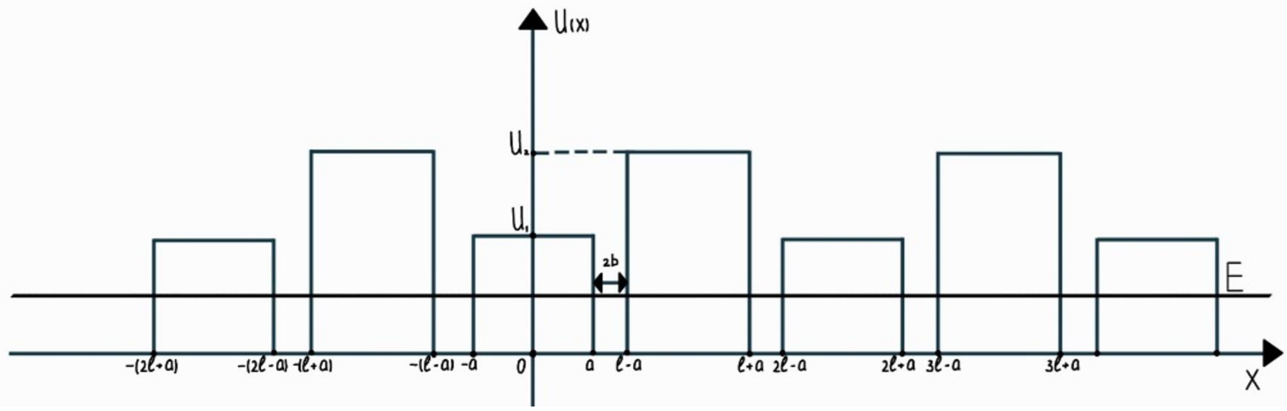

Рис.1. Модифицированный периодический потенциал.

Функция потенциальной энергии $U(x)$ на интервале одного полного периода принимает вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & -a \le x \le a, \\ U_2, & L - a \le x \le L + a, \\ 0, & \text{в остальных точках,} \end{cases} \qquad U(x+L) = U(x). \tag{1}$$

где $L = 4a + 4b$. При $U_1 = U_2$ выражение (1) воспроизводит классический потенциал Кронига–Пенни (рис. 2).

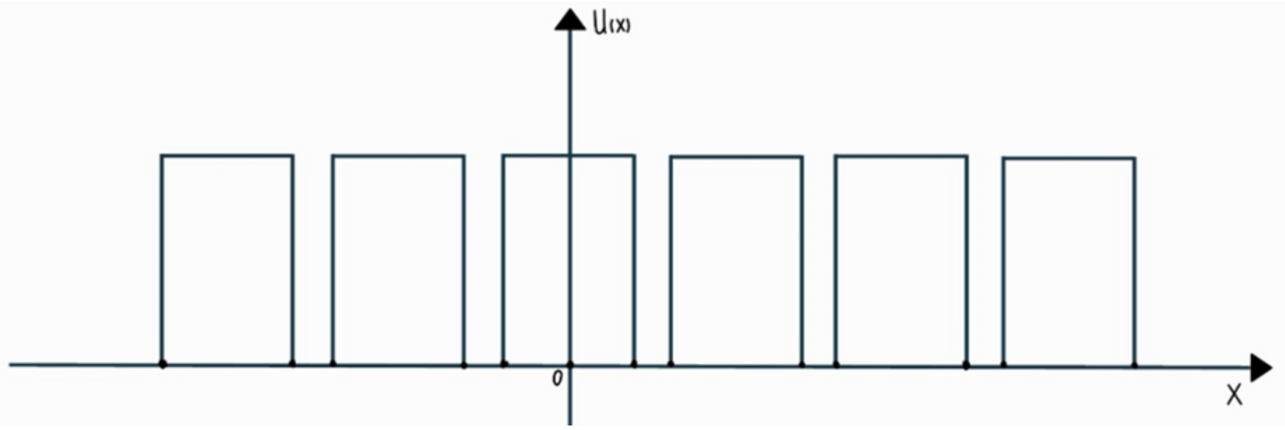

Рис.2. Периодический потенциал модели Кронига-Пенни

Для конфигурации $U_1 \neq U_2$ прямое применение метода сшивки волновых функций на границах барьеров приводит к дисперсионному уравнению, которое в пределе $U_1 \to U_2$ воспроизводит стандартный результат Кронига–Пенни. Чтобы получить спектр, корректно переходящий к классическому случаю, потенциал представляется как сумма двух периодических решёток одинакового подпериода $l = 2a + 2b$, содержащих, соответственно, барьеры U_1 и U_2 (рис. 1 и 2). Каждая из решёток описывается собственной матрицей перехода; объединяя их, удаётся получить дисперсионное соотношение, полностью согласующееся с моделью Кронига–Пенни при $U_1 = U_2$ и позволяющее анализировать влияние неоднородности барьеров на зонную структуру твёрдого тела.

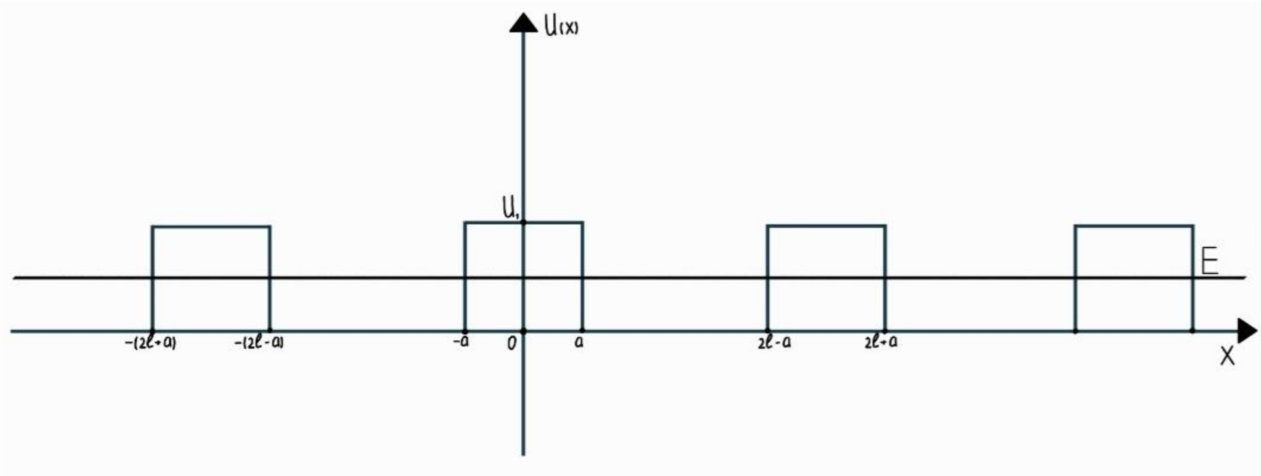

Рис.3. Периодическая структура U_1.

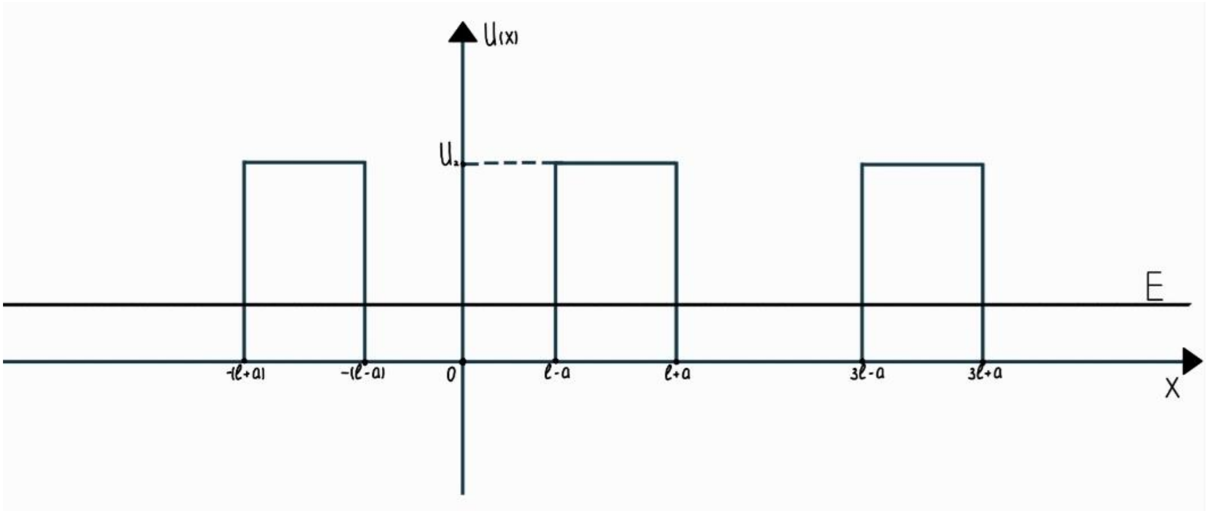

Рис.4. Периодическая структура U_2.

В дальнейшем работа ограничивается областью энергий $E \leq U_1 \leq U_2$, при которой волновая функция осциллирует в потенциальных ямах и экспоненциально затухает внутри обоих барьеров.

Решение для структуры U_1. Рассмотрим участок подпериода $(-l/2 \leq x \leq l/2)$ со схемой «яма – барьер U_1 – яма». Для этой конфигурации стационарное уравнение Шрёдингера даёт

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}, \quad -\,\big(l/2 - a\big) < x < -a, \\ \psi_2(x) &= C\,e^{-\chi x} + D\,e^{\chi x}, \quad -a \leq x \leq a, \\ \psi_3(x) &= F\,e^{ikx} + G\,e^{-ikx}, \quad a < x < l/2 - a, \end{aligned} \tag{2}$$

где $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, $\chi^2 = 2\mu(U_1 - E)/\hbar^2$, k – волновой вектор в областях с нулевым потенциалом, χ – коэффициент экспоненциального затухания волновой функции в области барьера высоты U_1. Таким образом, текущий анализ касается только структуры, содержащей барьеры U_1, без учёта барьеров U_2. Наложив условия непрерывности волновой функции и её производной на границах барьера $x = \pm a$ получим систему уравнений для коэффициентов A, B, F, G, решение которой приводит к выражению связи между ними в виде матрицы перехода [1]:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} \tag{3}$$

где матрица $\mathbf{M}$ имеет вид:

$$\mathbf{M}(\chi) = \begin{pmatrix} \left[\cosh 2\chi a + \frac{i}{2}\,\varepsilon(\chi)\sinh 2\chi a\right] e^{2ika} & \frac{i}{2}\,\eta(\chi)\sinh 2\chi a \\ -\frac{i}{2}\,\eta(\chi)\sinh 2\chi a & \left[\cosh 2\chi a - \frac{i}{2}\,\varepsilon(\chi)\sinh 2\chi a\right] e^{-2ika} \end{pmatrix} \tag{4}$$

где

$$\varepsilon(\chi) = \frac{\chi}{k} - \frac{k}{\chi}, \quad \eta(\chi) = \frac{\chi}{k} + \frac{k}{\chi} \tag{5}$$

Матрица (4) переводит вектор амплитуд стоячей волны $(A, B)^T$, заданный на **левой** границе барьера $x = -a$, в вектор $(F, G)^T$ на **правой** границе $x = +a$. Диагональные множители $e^{\pm 2ika}$ отражают свободный ход электрона через две прилегающие к барьеру U_1 ямы длиной b. Иными словами, $\mathbf{M}$ описывает полный проход участка *«яма (b) – барьер U_1 – яма (b)»* внутри подрешётки U_1. Если представить матрицу $\mathbf{M}$ в общем виде

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \alpha_1 + i\beta_1 & \alpha_2 + i\beta_2 \\ \alpha_3 + i\beta_3 & \alpha_4 + i\beta_4 \end{pmatrix} \tag{6}$$

и сравнить (4) и (6), то обнаружится, что восемь действительных коэффициентов α_1, β_1, α_2, β_2, α_3, β_3, α_4, β_4 удовлетворяют шести условиям:

$$\alpha_1 = \alpha_4, \quad \beta_1 = -\beta_4, \quad \alpha_2 = \alpha_3 = 0, \quad \beta_2 = -\beta_3 \tag{7}$$

а из условия $\det \mathbf{M} = 1$ следует дополнительное соотношение

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 - \beta_2^2 = 1 \tag{8}$$

Таким образом, из восьми действительных параметров α и β независимыми остаются только два, поскольку матрица $\mathbf{M}$ явно зависит только от независимых переменных χa и ka. Эти свойства отражают унитарность $\mathbf{M}$ и зеркальную симметрию подрешётки с барьерами U_1.

Решение для структуры U_2. Теперь рассмотрим периодическую структуру U_2 на участке $(l - a < x < l + a)$. Решение одномерного стационарного уравнения Шредингера на этом участке будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \psi_4(x) &= \tilde{A}e^{ikx} + \tilde{B}e^{-ikx}, \ \text{при} \ -(l-a) < x < l-a \\ \psi_5(x) &= \tilde{C}e^{-qx} + \tilde{D}e^{qx}, \ \text{при} \ l-a \le x \le l+a \\ \psi_6(x) &= \tilde{F}e^{ikx} + \tilde{G}e^{-ikx}, \ \text{при} \ l+a < x < 3l-a \end{aligned} \tag{7}$$

где $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, $q^2 = 2\mu(U_2 - E)/\hbar^2$.

Наложение условий непрерывности на границах барьера $x = l - a$ и $x = l + a$ приводит к системе уравнений для коэффициентов $\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{F}, \tilde{G}$. Связь между коэффициентами может быть записана в виде матрицы перехода:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A} \\ \tilde{B} \end{pmatrix} = \widetilde{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} \tilde{F} \\ \tilde{G} \end{pmatrix} \tag{8}$$

где матрица $\widetilde{\mathbf{M}}$ имеет вид:

$$\widetilde{\mathbf{M}}(q) = \begin{pmatrix} \left[\cosh 2qa + \frac{i}{2}\,\varepsilon(q)\sinh 2qa\right] e^{2ika} & \frac{i}{2}\,\eta(q)\sinh 2qa \\ -\frac{i}{2}\,\eta(q)\sinh 2qa & \left[\cosh 2qa - \frac{i}{2}\,\varepsilon(q)\sinh 2qa\right] e^{-2ika} \end{pmatrix} \tag{9}$$

где

$$\varepsilon(q) = \frac{q}{k} - \frac{k}{q}, \quad \eta(q) = \frac{q}{k} + \frac{k}{q} \tag{10}$$

Аналогично матрице $\mathbf{M}$ для подрешётки U_1, матрица $\widetilde{\mathbf{M}}$ переносит амплитуды с **левой границы** барьера $x = L - a$ на **правую** $x = L + a$. Фазовые множители $e^{\pm 2ika}$ описывают свободный ход электрона через две прилегающие к барьеру U_2 ямы длиной b. Иными словами, $\widetilde{\mathbf{M}}$ задаёт полный проход участка *«яма (b) – барьер U_2 – яма (b)»* внутри подрешётки U_2. Элементы матрицы $\widetilde{\mathbf{M}}$ подчиняются тем же симметричным соотношениям, что и для $\mathbf{M}$:

$$\tilde{\alpha}_1 = \tilde{\alpha}_4, \quad \tilde{\beta} = \tilde{\beta}_4, \quad \tilde{\alpha}_2 = \tilde{\alpha}_3 = 0, \quad \tilde{\beta}_2 = -\tilde{\beta}_3 \tag{11}$$

а требование $\det \widetilde{\mathbf{M}} = 1$ вновь даёт условие

$$\tilde{\alpha}_1^2 + \tilde{\beta}_1^2 - \tilde{\beta}_2^2 = 1 \tag{12}$$

Таким образом, обе подрешётки описываются матрицами одного и того же вида; отличия заключаются лишь в параметрах затухания (χ для U_1 и q для U_2). В следующем разделе эти матрицы будут объединены, и через условие Блоха будет получено итоговое дисперсионное соотношение.

Объединение подрешёток. После перехода $x \to x + l$ амплитуды $(A_n, B_n)^T$ стоячей волны на левой стенке очередного барьера U_1, выражаются через амплитуды $(F_n, G_n)^T$ на правой стенке соседнего барьера U_2. Если обозначить

$$\mathbf{M}_1 \equiv \mathbf{M}(k, \chi) \quad \text{и} \quad \mathbf{M}_2 \equiv \widetilde{\mathbf{M}}(k, q)$$

как матрицы переноса (4) и (9) для подрешёток U_1 и U_2 соответственно, то полный перенос через суперпериод L описывается их **произведением**

$$\mathbf{M}_{\text{tot}} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \tag{13}$$

Здесь важно подчеркнуть, что «суммирование» фигурировало лишь на этапе построения потенциала как линейной суперпозиции двух периодических функций $U = U_1 + U_2$. Для переноса же волновой функции действует последовательное применение линейных операторов; следовательно, свёртывание двух подрешёток даёт именно *композицию операторов*, что математически реализуется перемножением матриц. Матрица $\mathbf{M}_{\mathrm{tot}}$ связывает вектор амплитуд в начале и в конце суперячейки

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{\mathrm{tot}} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{M}_{\mathrm{tot}} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1, \tag{14}$$

где

- $(A_n, B_n)^{\mathrm{T}}$ — амплитуды стоячей волны на **левой** границе барьера U_1 в n-й суперячейке;
- $(A_{n+1}, B_{n+1})^{\mathrm{T}}$ — амплитуды на той же границе барьера U_1 после сдвига $x \to x + L$ (то есть в $(n+1)$-й суперячейке).

Аналогично для правой части суперячейки можно писать

$$\begin{pmatrix} F_{n+1} \\ G_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{\mathrm{tot}} \begin{pmatrix} F_n \\ G_n \end{pmatrix},$$

если нужно отслеживать эволюцию амплитуд (F, G) за барьером U_2.

Обозначим

$$\varepsilon_1 = \frac{\chi}{k} - \frac{k}{\chi}, \quad \eta_1 = \frac{\chi}{k} + \frac{k}{\chi}, \qquad \varepsilon_2 = \frac{q}{k} - \frac{k}{q}, \quad \eta_2 = \frac{q}{k} + \frac{k}{q},$$

$k = \sqrt{2\mu E}/\hbar,\ \chi = \sqrt{2\mu(U_1 - E)}/\hbar,\ q = \sqrt{2\mu(U_2 - E)}/\hbar.$

Тогда

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \left[\cosh 2\chi a + \frac{i\varepsilon_1}{2} \sinh 2\chi a\right] e^{2ika} & \frac{i\eta_1}{2} \sinh 2\chi a \\ -\frac{i\eta_1}{2} \sinh 2\chi a & \left[\cosh 2\chi a - \frac{i\varepsilon_1}{2} \sinh 2\chi a\right] e^{-2ika} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \left[\cosh 2qa + \frac{i\varepsilon_2}{2} \sinh 2qa\right] e^{2ika} & \frac{i\eta_2}{2} \sinh 2qa \\ -\frac{i\eta_2}{2} \sinh 2qa & \left[\cosh 2qa - \frac{i\varepsilon_2}{2} \sinh 2qa\right] e^{-2ika} \end{pmatrix}.$$

Перемножая, получаем $\mathbf{M}_{\mathrm{tot}}$. Для периодической системы условие Блоха

$$\mathbf{M}_{\mathrm{tot}} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = e^{i\kappa l} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

эквивалентно

$$\boxed{\cos(\kappa l) = \tfrac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,\mathbf{M}_{\mathrm{tot}}(E)}.$$

В явном виде

$$\begin{aligned}\cos(\kappa l) = \;& \cosh(2\chi a)\cosh(2qa)\cos(2kb) \\ & - \frac{\eta_1}{2}\sinh(2\chi a)\cosh(2qa)\sin(2kb) - \frac{\eta_2}{2}\sinh(2qa)\cosh(2\chi a)\sin(2kb) \\ & + \frac{\eta_1\eta_2}{4}\sinh(2\chi a)\sinh(2qa)\big[1-\cos(2kb)\big].\end{aligned}$$

Это **правильное дисперсионное соотношение** для чередующихся барьеров высот U_1, U_2.

- Замена $U_1 = U_2 = U_0$ ($\chi = q$) приводит к классическому результату Кронига–Пенни.
- При $b \to 0$ (слияние барьеров) формула сворачивается в выражение для единственного барьера ширины $2a$.

Список литературы:

1. Eugen Merzbacher "Quantum mechanics, second edition" (University of North Carolina)

2. Heinz Kalt, Claus F. Klingshirn "Electrons n a Periodic Crystal Potential" (2019)

3. Masatsugu Sei Suzuki "Kronig Penney model" (Department of Physics, SUNY at Binghamton, December 27, 2014)

3. Kronig R. de L., Penney W.G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. – 1931. – V. 130. – P. 499–513.

4. А.Н. Кислов "Нерелятивистская квантовая механика" (Москва "Высшая школа" 1978)