УДК 539.2

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОЛНЫ С ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТОМ В СРЕДЕ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИЕЙ

САВОТЧЕНКО Сергей Евгеньевич,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры естественно-математического образования и информационных технологий,
Белгородский институт развития образования

АННОТАЦИЯ. *Предложена новая модель точечного дефекта, учитывающего дальнодействующие силы межатомного взаимодействия в среде с пространственной дисперсией. В рамках модели на основе уравнения Шредингера с модифицированным короткодействующим потенциалом получен спектр квазилокальных состояний. Показано, что существует два вида локализованных вблизи дефекта состояний, переходящих из обычных в обобщенные в зависимости от значения энергии волны.*
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: *уравнение Шредингера, пространственная дисперсия, точечный дефект, квазилокальные состояния, локализованные состояния.*

SAVOTCHENKO S.E.,
Dr. Phys. Math. Sci., Professor of the Department of Natural and Mathematics Education and Computer Science,
Belgorod Institute of Education Development

PECULIARITIES OF THE WAVE INTERACTION WITH A POINT DEFECT IN THE MEDIUM WITH SPATIAL DISPERSION

ABSTRACT. *Taking into account the long-range interatomic forces, a new model of point defect in the medium with spatial dispersion is proposed. Spectrum of quasi-localized states is derived in within the framework of the model basing on Schrodinger equation with modified long-range potential. It has been shown that there are two kinds of states localized near the defect, transferring from ordinary into generalized depending on the value of the wave energy.*
KEY WORDS: *Schrodinger equation, spatial dispersion, point defect, quasi-local states, localized states*

Как известно из теории полупроводников, закон дисперсии носителей заряда является непараболическим и может рассматриваться параболическим лишь в малой окрестности дна первой зоны Бриллюэна [1]. Вблизи потолка валентной зоны полупроводниковых кристаллов на основе германия, кремния и арсенида галлия, где имеется касание двух зон, закон дисперсии электрона вблизи экстремума записывается в корневом виде. Законы дисперсии биквадратного вида используются для описания низкоэнергетических участков энергетического спектра электронов и дырок в ряде полупроводниковых кристаллов, что подтверждается не только теоретическими расчетами, но экспериментальными данными [2]. Например, для невырожденных зон как электронов, так и дырок кристалла In_4Se_3 в окрестности запрещенного энергетического промежутка зависимость энергии от волнового вектора $\mathbf{k}=(k_x, k_y, k_z)$ соответствует закону дисперсии $E(\mathbf{k}) = E_0 + \alpha_x k_x^2 + \alpha_y k_y^2 + \alpha_z k_z^2 + \beta_x k_x^4 + \beta_y k_y^4 + \beta_z k_z^4$, где $|\alpha_i| << |\beta_i|$, $i=x, y, z$. Закон дисперсии такого вида применятся для описания целого ряда полупроводниковых кристаллов с химическим составом на основе индия и селена. В связи с этим становятся актуальными вопросы изучения особенностей процессов рассеяния электронов на точечных дефектах в кристаллах с законами дисперсии, отклоняющимися от параболического.

Рассмотрим проблему взаимодействия волны с точечным дефектом в среде с пространственной дисперсией при учете дальнодействующих сил межатомного взаимодействия на примере простой одномерной модели, основанной на стационарном уравнении Шредингера [3; 4]:

$$E\psi = -\frac{1}{2}\psi'' + \frac{1}{2}\beta\psi^{(4)} + U(x)\psi, \tag{1}$$

где волновая функция ψ описывает поведение волны (или квазичастицы) с энергией E, в единицах, в которых постоянная Планка и эффективная масса равны 1. Закон дисперсии свободно распространяющейся волны: $E = k^2/2 + \beta k^4/2$, где k – волновое число, пространственная дисперсия среды характеризуется параметром β.

Потенциал точечного дефекта, расположенного в начале координат, с целью согласования порядка малости взаимодействия в среде с пространственной дисперсией должен фактически представлять собой обобщение разложения короткодействующего потенциала в окрестности точки x=0:

$$U(x) = U_0\delta(x) + V_0\delta''(x), \tag{2}$$

где U_0 и V_0 – параметры дефекта. Можно сказать, что потенциал (2) учитывает влияние дефекта посредством не только ближайших соседей в решетке, но и вторых соседей в коротковолновом прибли-

Информация для связи с автором: savotchenko@bsu.edu.ru

жении, то есть при переходе от дискретной модели среды к континуальному описанию. Подстановка (2) в (1) приводит к основному уравнению модели:

$$E\psi = -\frac{1}{2}\psi'' + \frac{1}{2}\beta\psi^{(4)} + U_0(\delta(x) + \eta\delta''(x))\psi. \quad (3)$$

где введен параметр $\eta = V_0/U_0$. Уравнение (3) применимо в условиях малости величин $k\beta << 1$ и $k\eta << 1$.

Далее необходимо сформулировать систему граничных условий к дифференциальному уравнению четвертого порядка (3). Первое условие является традиционным требованием непрерывности волновой функции всюду на числовой оси:

$$[\psi]_0 = 0, \quad (4)$$

где использовано обозначение скачка функции в точке: $[f]_a = f(+a) - f(-a)$.

Если непосредственно проинтегрировать уравнение (3) по x на малом интервале $[-\varepsilon; \varepsilon]$ и устремить ε к нулю (то есть проинтегрировать вблизи точки $x = 0$), то получится условие:

$$[\psi' - \beta\psi''']_0 = 2U_0\{\psi(0) + \frac{1}{2}\eta\big(\psi''(+0) + \psi''(-0)\big)\}. \quad (5)$$

Если умножить уравнение (3) на x^2 и также проинтегрировать его по x на малом интервале $[-\varepsilon; \varepsilon]$, учитывая свойства дельта-функции, а затем устремить ε к нулю, то получится новое условие:

$$[\psi']_0 = -2\xi U_0\psi(0), \quad (6)$$

где введено обозначение $\xi = \eta/\beta$. Если теперь умножить уравнение (3) на x и также проинтегрировать его по x на малом интервале $[-\varepsilon; \varepsilon]$, учитывая свойства дельта-функции, а затем устремить ε к нулю, то получится еще одно условие:

$$[\psi'']_0 = \xi U_0\{\psi'(+0) + \psi'(-0)\}. \quad (7)$$

Таким образом, получен полный набор граничных условий (4)-(7) к уравнению (3). Если выражение (6) подставить в условие (5), то его можно переписать в виде:

$$\beta[\psi''']_0 = -2U_0\{(1+\xi)\psi(0) + \frac{1}{2}\eta\big(\psi''(+0) + \psi''(-0)\big)\}. \quad (8)$$

Важным аспектом является корректный предельный переход от рассматриваемой модели (3)–(7) к модели среды с точечным дефектом без дисперсии, которая, как известно, описывается уравнением:

$$E\psi = -\frac{1}{2}\psi'' + U_0\delta(x)\psi, \quad (9)$$

с требованиями непрерывности волновой функции (4) и скачка ее производной:

$$[\psi']_0 = 2U_0\psi(0). \quad (10)$$

Закон дисперсии свободно распространяющейся волны для уравнения (9): $E = k^2/2$.

Очевидно, что уравнение (9) получается из (3) при $\beta \to 0$ и $\eta \to 0$. Однако для перехода к условию (10) из (6) должно выполняться дополнительное требование $\xi \to -1$ при $\beta \to 0$ и $\eta \to 0$. При выполнении данного требования такой предельный переход как из условия (5), так и из условия (6) дает согласованный результат. Случай системы с точечным дефектом с внутренней структурой в среде без пространственной дисперсии был подробно проанализирован в [5].

Рассмотрим теперь два частных случая, соответствующих симметричным и антисимметричным состояниям, существование которых в силу симметрии, рассматриваемой в данной модели системы, возможно.

Симметричное состояние описывается четной волновой функцией $\psi_s(-x) = \psi_s(x)$. Для такой функции условия (4) и (7) выполняются автоматически, а условия (6) и (8) упрощаются и переходят в выражения:

$$\psi_s'(+0) = -\xi U_0\psi_s(0), \quad (11)$$

$$\beta\psi_s'''(+0) = -U_0\{(1+\xi)\psi_s(0) + \eta\psi_s''(0)\}. \quad (12)$$

Антисимметричное состояние описывается нечетной волновой функцией $\psi_a(-x) = -\psi_a(x)$. Для такой функции непрерывными становятся первая и третья производные в точке x=0, что соответствует равенству нулю скачков производных $[\psi_a']_0 = 0$ и $[\psi_a''']_0 = 0$. В силу этого условия (4) и (7) упрощаются и переходят в выражения:

$$\psi_a(+0) = 0, \quad (13)$$

$$\psi_a''(+0) = \xi U_0\psi_a'(0)\}. \quad (14)$$

Используя полученные условия, можно проанализировать возможные состояния во всем энергетическом спектре [6; 7]. При $E > 0$ в рассматриваемой системе существуют симметричные и антисимметричные квазилокальные состояния, характеризуемые двумя компонентами волновой функции, для одной из которых волновое число вещественное k_1=k, $k^2 = -k_m^2 + \sqrt{k_m^4 + 2E/\beta}$, $k_m^2 = 1/2\beta$, а для другой – мнимое $k_2 = iq$:$q^2 = k_m^2 + \sqrt{k_m^4 + 2E/\beta}$. Волновая функция квазилокальных симметричных состояний имеет вид:

$$\psi_s(x) = \begin{cases} A_s \cos(kx + \varphi) + B_s e^{qx}, & x < 0 \\ A_s \cos(kx - \varphi) + B_s e^{-qx}, & x > 0, \end{cases} \tag{15}$$

где A_s, B_s – амплитуды, φ_s– фаза, определяемые энергией E и параметрами уравнения (3). Подстановка (15) в условия (11) и (12) позволяет получить связь:

$$B_s = A_s(k \sin\varphi_s + \xi U_0 \cos\varphi_s)/(q - \xi U_0). \tag{16}$$

Подобным образом получается дисперсионное соотношение, связывающее фазу с энергией E и параметрами уравнения (3), которое определяет непрерывный спектр квазилокальных состояний симметричного вида:

$$tg\varphi_s = \frac{k}{U_0} \cdot \frac{\beta(k^2 + q^2)(q - \xi U_0) - U_0(1 + \xi)}{q(1 + \xi) - \eta(k^2 + q^2)(q - \xi U_0)}. \tag{17}$$

Из (17) при $\xi = 0$, но $\beta \neq 0$ получается приведенное в [6] дисперсионное соотношение, соответствующее спектру квазилокальных симметричных состояний в среде с пространственной дисперсией в поле короткодействующего потенциала точечного дефекта при $V_0 = 0$.

Волновая функция квазилокальных антисимметричных состояний имеет вид:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} A_a \sin(kx + \varphi_a) - B_a e^{qx}, & x < 0 \\ A_a \sin(kx - \varphi_a) + B_a e^{-qx}, & x > 0, \end{cases} \tag{18}$$

где A_a, B_a – амплитуды, φ_a– фаза, определяемые энергией E и параметрами уравнения (3). Подстановка (18) в условия (13) и (14) позволяет получить связь между амплитудами:

$$B_a = A_a \sin\varphi_a, \tag{19}$$

Аналогично получается дисперсионное соотношение, связывающее фазу с энергией E и параметрами уравнения (3), которое определяет непрерывный спектр квазилокальных состояний антисимметричного вида:

$$tg\varphi = \frac{k\xi U_0}{k^2 + q^2 + q\xi U_0}. \tag{20}$$

Из (20) видно, что при $V_0 = 0$ антисимметричных квазилокальных состояний не существует, что согласуется с выводами [3] для среды с пространственной дисперсией в поле короткодействующего потенциала точечного дефекта.

При $E < 0$ в среде с пространственной дисперсией при наличии точечного дефекта с учетом разложения потенциала (2) существует два вида локализованных состояний, причем в зависимости от значения энергии локализованные состояния могут быть обычными и обобщенными. Обычные локализованные состояния описываются волновой функцией вида $\psi \sim \exp(-qx)$ с вещественным декрементом затухания q, а обобщенные локализованные состояния характеризуются комплексным декрементом затухания $q = -\gamma + i\Omega$ с волновой функцией вида $\psi \sim \exp(-\gamma x)\cos(\Omega x)$.

В интервале энергий $-E_m < E < 0$ декременты затуханий обоих ветвей вещественные, определяющие обычные локализованные состояния. Симметричное относительно расположения дефекта состояние описывается четной волновой функцией:

$$\psi_s(x) = \begin{cases} M_1 e^{q_1 x} + M_2 e^{q_2 x}, & x < 0 \\ M_1 e^{-q_1 x} + M_2 e^{-q_2 x}, & x > 0, \end{cases} \tag{21}$$

где $q_{1,2}^2 = k_m^2 \pm \sqrt{k_m^4 - 2|E|/\beta}$. Подстановка (21) в условия (11) и (12) позволяет получить дисперсионное соотношение, определяющее уровни локализованных состояний симметричного вида:

$$U_0(1 + \xi) + \beta(q_1 - \xi U_0)(q_2 - \xi U_0)(q_1 + q_2) = 0. \tag{22}$$

Константы в (21) связаны соотношением:

$$M_2 = -M_1(q_1 - \xi U_0)/(q_2 - \xi U_0). \tag{23}$$

Антисимметричное локализованное состояние описывается нечетной волновой функцией:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} -L_1 e^{q_1 x} - L_2 e^{q_2 x}, & x < 0 \\ L_1 e^{-q_1 x} + L_2 e^{-q_2 x}, & x > 0, \end{cases} \tag{24}$$

Подстановка (24) в условия (13) и (14) позволяет получить дисперсионное соотношение, определяющее уровни локализованных состояний антисимметричного вида:

$$q_1 + q_2 = -\xi U_0. \tag{25}$$

Константы в (24) связа • Естественные науки

$$L_2 = -L_1.$$

При дальнейшем уменьшении энергии происходит переход от обычных локализованных состояний к обобщенным. При $E < -E_m$ две компоненты волновых функций обобщенных локализованных состояний имеют комплексные декременты затухания:

$$q_{1,2} = \gamma \pm i\Omega, \quad (26)$$

где $\gamma = (((2|E|/\beta)^{1/2} + k_m^2)/2)^{1/2}$, $\Omega = (((2|E|/\beta)^{1/2} - k_m^2)/2)^{1/2}$.

Симметричное обобщенное локализованное состояние описывается четной волновой функцией:

$$\psi_s(x) = \begin{cases} -C_s e^{\gamma x} \sin(\Omega x + \delta), & x < 0 \\ C_s e^{-\gamma x} \sin(\Omega x - \delta), & x > 0 \end{cases} \quad (27)$$

где фаза δ определяется соотношением:

$$e^{2i\delta} = \frac{q_1 - \xi U_0}{q_2 - \xi U_0}.$$

Уровни энергии симметричных обобщенных локализованных состояний определяются дисперсионным соотношением, полученным после подстановки (27) в условия (11) и (12):

$$U_0(1 + \xi) + 2\beta\gamma(\gamma^2 + \Omega^2 - 2\gamma\xi U_0 + (\xi U_0)^2) = 0. \quad (28)$$

Антисимметричное обобщенное локализованное состояние описывается нечетной волновой функцией:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} C_a e^{\gamma x} \sin \Omega x, & x < 0 \\ C_a e^{-\gamma x} \sin \Omega x, & x > 0. \end{cases} \quad (29)$$

Подстановка (29) в условия (13) и (14) позволяет получить уровни энергии антисимметричных обобщенных локализованных состояний, определяемые дисперсионным соотношением:

$$2\gamma = -\xi U_0. \quad (30)$$

Из (25) и (30) следует, что антисимметричные локализованные состояния, как обычные (24), так и обобщенные (29), могут существовать только при $\xi U_0 < 0$.

Таким образом, дальнодействующие силы межатомного взаимодействия в среде с пространственной дисперсией описаны модификацией короткодействующего потенциала, моделирующего точеный дефект. В результате была получена новая система граничных условий для уравнения Шредингера с пространственной дисперсией и таким модифицированным потенциалом. Показан корректный предельный переход к случаю среды без дисперсии с короткодействующим потенциалом. Установлено, что при наличии точечного дефекта в среде с дисперсией при учете дальнодействующих сил межатомного взаимодействия возможно существование локализованных состояний двух видов симметрии с двумя типами затухания (монотонного – обычные и осциллирующего – обобщенные), а также квазилокальных состояний двух видов симметрии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Павлов, П.В. Физика твердого тела [Текст] / П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. – М. : Высш. шк., 2000. – 494 с.
2. Kharkhalis, L.Yu. Dispersion Law with a Low-Energy Non-Parabolicity for the Charge Carriers in the In4Se3 Crystal and Related Effects / L.Yu. Kharkhalis, V.A. Shenderoviskh, M.A. Sznajder, D.M. Bercha // Acta Physica Polonica A. – 2009. – Vol. 116. – No. 5. – pp. 952–953.
3. Савотченко, С.Е. Квазилокальные состояния и особенности резонансного рассеяния частиц дефектами в полупроводниковых кристаллах, обладающих зонной структурой энергетического спектра [Текст] / С.Е. Савотченко // Физика и техника полупроводников. – 2000. – Т. 34. – № 11. – С. 1333–1338.
4. Савотченко, С.Е. Особенности плотности квазилокальных состояний при наличии дефектов в средах с пространственной дисперсией [Текст] / С.Е. Савотченко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2002. – Т. 45. – № 12. – С. 1148–1158.
5. Красильников, В.В. Особенности рассеяния частиц точечным дефектом с внутренней структурой [Текст] / В.В. Красильников, С.Е. Савотченко // Известия Тульского государственного университета. Естественные науки. – 2015. – № 4 – С. 178–183.
6. Косевич, А.М. Особенности двуканального резонансного рассеяния волны или частицы на плоском дефекте [Текст] / А.М. Косевич// ЖЭТФ. – 1999. – Т. 115. – № 1.– С. 306–317.
7. Косевич, А.М. Особенности плотности квазилокальных состояний вдоль резонансных кривых в сплошном спектре [Текст] / А.М. Косевич, Д.В. Мацокин, С.Е. Савотченко // Письма в ЖЭТФ. – 2001. – Т. 73. – № 11–12. – С. 680–683.