Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Б. С. Павлов, А. А. Покровский, А. В. Стрепетов, Квазирелятивизм, узкозонные свойства и вынужденная динамика электронов в твердом теле, *ТМФ*, 2002, том 131, номер 1, 72–83

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1951>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.80.97.219

26 апреля 2023 г., 14:11:55

© 2002 г. Б. С. Павлов^{*,†}, А. А. Покровский^{*}, А. В. Стрепетов[‡]

КВАЗИРЕЛЯТИВИЗМ, УЗКОЗОННЫЕ СВОЙСТВА И ВЫНУЖДЕННАЯ ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Узкозонные полупроводники, которые применяются для создания квантовых сетей, характеризуются малыми эффективными массами электронов на уровне Ферми и, следовательно, большой подвижностью электронов в решетке. В предлагаемой работе построена явно решаемая модель, проясняющая один из возможных механизмов возникновения малых эффективных масс. Другая построенная в работе математическая модель описывает возможный механизм управления переменным квантовым током через одномерную решетку с помощью бегущей волны.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известная формула Ландауэра [1] для квантовой проводимости позволяет свести описание квантового тока [2] в квазиодномерных нанопроволоках к решению одномерной задачи рассеяния и вычислению соответствующего коэффициента прохождения $T(E)$, стоящего в амплитуде асимптотически плоских волн

$$\psi(x, E) \approx \begin{cases} e^{-i\sqrt{E}x} + \mathcal{R}e^{i\sqrt{E}x}, & x \rightarrow +\infty, \\ T e^{-i\sqrt{E}x}, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}$$

Усреднение с учетом распределения Ферми [3]

$$f(E, E_F) = \frac{CV\sqrt{E}}{\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right) + 1},$$

где E_F – уровень Ферми, дает обобщение формулы Ландауэра – вольт-амперную характеристику $j(U)$ – на случай ненулевой температуры и конечного напряжения U , приложенного к проволоке:

$$j(U) = \frac{e^2}{h} \int \frac{|T(E)|^2}{1 - |T(E)|^2} [f(E, E_F + eU) - f(E, E_F - eU)] dE. \quad (1)$$

---

^{*}Институт физики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, Россия

[†]Факультет математики университета Окленда, Окленд, Новая Зеландия

[‡]Государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия

Предполагая, что электроны в резервуарах по обеим сторонам проволоки являются почти свободными, можно выразить плотность состояний в (1) через импульс как $dE = 2k dk$. Для существенно малых значений коэффициента прохождения $T(E)$ формула (1) сводится к более простому виду

$$j(U) = \frac{e^2}{h} \int |T(E)|^2 [f(E, E_F + eU) - f(E, E_F - eU)] dE. \quad (2)$$

Ниже мы будем рассматривать вопросы, связанные с *баллистическим* переносом электронов в нанопроволоке, пренебрегая на этой стадии электрон-электронным и электрон-фононным взаимодействиями и ограничиваясь только одночастичной задачей. При этом мы уделим особое внимание вычислению эффективной массы [4] электрона в решетке. В действительности значение эффективной массы определяет подвижность электронов: свободный пробег и длину волны де Бройля. Предположение малости эффективной массы лежит в основе применения методов теории рассеяния к описанию баллистического переноса электронов в нанoeлектронных сетях [5]–[8]. В данной работе проанализированы два возможных механизма появления малой эффективной массы в сверхрешетках: механизм, основанный на сильном взаимодействии блоков сверхрешетки, и механизм, основанный на слабом взаимодействии между подрешетками. Соответственно рассматриваются два примера, которые показывают, что электроны в слабо связанных или сильно связанных сверхрешетках могут проявлять квазирелятивистское поведение и подчиняться уравнениям, аналогичным одномерным уравнениям Дирака, которые *выводятся из первых принципов* в предположении низкой температуры и слабых внешних электрических полей.

Основываясь на полученных уравнениях Дирака, мы рассмотрим периодические по времени возмущения в виде бегущей волны и локализованного сингулярного потенциала. В обоих случаях коэффициент прохождения обнаруживает спектральную зонную структуру. Этот эффект может быть использован для управления квантовым током в квантовых сетях, построенных из узкозонных сверхрешеток.

2. СВЕРХРЕШЕТКИ С МАЛОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ

В этом разделе мы построим явно решаемую модель квантового волновода с малой эффективной массой носителей заряда, порожденной расщеплением между уровнями энергии электрона в базовом блоке соответствующей решетки и сильным взаимодействием между блоками.

Рассмотрим эрмитову (2×2) -матрицу $Q: E \rightarrow E$ с вещественными собственными значениями q_1, q_2 . Введя среднее значение $q_0 := (q_1 + q_2)/2$ и расщепление $\delta := (q_1 - q_2)/2 > 0$, мы можем представить эту матрицу как

$$Q = q_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\delta}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Будем использовать Q в качестве блока при построении периодического решеточного оператора $\mathcal{Q}$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{E} := l_2 \times E = l_2(E)$ бесконечных последовательностей $\vec{f} = \{\vec{f}_l\}_{l=-\infty}^{\infty}$, $\vec{f}_l \in E$.

Обозначим через $\mathcal{T}$ оператор сдвига в $\mathcal{E}$

$$\mathcal{T}\{\vec{f}_l\}_{l=-\infty}^{\infty} = \{\vec{f}'_l\}_{l=-\infty}^{\infty}, \quad \vec{f}'_l = \vec{f}_{l-1},$$

и через $\mathcal{I}$ единичный оператор в l_2 . Введем также операторы проектирования P_1, P_2 соответственно на первую и вторую компоненты каждого вектора $\vec{f}_l$,

$$P_1 \vec{f} = \left\{ \begin{pmatrix} f_{l,1} \\ 0 \end{pmatrix} \right\}_{l=-\infty}^{\infty}, \quad P_2 \vec{f} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ f_{l,2} \end{pmatrix} \right\}_{l=-\infty}^{\infty},$$

и операторы π_{12} перестановки компонент каждого вектора $\vec{f}_l$, например,

$$\pi_{12} \left\{ \begin{pmatrix} f_{l,1} \\ f_{l,2} \end{pmatrix} \right\}_{l=-\infty}^{\infty} = \left\{ \begin{pmatrix} f_{l,2} \\ f_{l,1} \end{pmatrix} \right\}_{l=-\infty}^{\infty}.$$

Требуемый одночастичный решеточный гамильтониан определяется формулой

$$\mathcal{Q} = Q \times \mathcal{I}_{L_2} - i\alpha\pi_{12}P_2\mathcal{T} + i\alpha\pi_{12}P_1\mathcal{T}^+. \quad (4)$$

Он может быть представлен в виде бесконечной периодической якобиевой матрицы с (2×2) -блоками Q на главной диагонали и взаимодействием между блоками, введенным при помощи операторов сдвига:

$$\begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & -i\alpha & 0 & \dots & \dots \\ i\alpha & q_0 + \frac{\delta}{\sqrt{2}} & \frac{\delta}{\sqrt{2}} & \dots & \dots \\ 0 & \frac{\delta}{\sqrt{2}} & q_0 - \frac{\delta}{\sqrt{2}} & -i\alpha & \dots \\ \dots & \dots & i\alpha & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Преобразование Фурье

$$\begin{aligned} \mathbf{F}\vec{f} &\longrightarrow \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\varphi} \vec{f}_l := F(\varphi), \\ \mathbf{F}\mathcal{T}\{\vec{f}_l\}_{l=-\infty}^{\infty} &= e^{i\varphi} F(\varphi) \end{aligned}$$

определяет подобие оператора $\mathcal{Q}$ оператору умножения в $L_2((-\pi, \pi), E)$ на матрицу-функцию

$$Q(\varphi) = \begin{pmatrix} q_0 + \frac{\delta}{\sqrt{2}} & \frac{\delta}{\sqrt{2}} + i\alpha e^{-i\varphi} \\ \frac{\delta}{\sqrt{2}} - i\alpha e^{i\varphi} & q_0 - \frac{\delta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Спектр σ_Q оператора Q задается дисперсионным уравнением

$$\det(Q(\varphi) - \lambda E) = (\lambda - q_0)^2 - \delta^2 - \alpha^2 + \alpha\delta\sqrt{2} - \alpha\delta\sqrt{2}(1 - \sin \varphi) = 0, \quad -\pi < \varphi < \pi, \quad (6)$$

и состоит из двух интервалов – верхней и нижней *спектральных зон* с лакуной между ними

$$(q_0 - [\delta^2 + \alpha^2 - \alpha\delta\sqrt{2}]^{1/2}, q_0 + [\delta^2 + \alpha^2 - \alpha\delta\sqrt{2}]^{1/2}).$$

Эффективная масса

$$m_\delta = \left[\frac{d^2 \lambda}{d\varphi^2} \right]^{-1}$$

вычисляется по дисперсионной зависимости $\lambda(\varphi)$, определяемой дисперсионным уравнением (6). На нижней границе верхней спектральной зоны $\varphi = \pi/2$, $\lambda = q_0 + [\delta^2 + \alpha^2 - \alpha\delta\sqrt{2}]^{1/2}$ она является положительной и равна

$$\frac{2[\delta^2 + \alpha^2 - \alpha\delta\sqrt{2}]^{1/2}}{\alpha\delta\sqrt{2}}.$$

Эффективная масса мала, как величина, обратная наименьшему из двух (больших) параметров α, δ .

Отметим, что оператор умножения (5) имеет равномерно сходящееся асимптотическое разложение для малых отклонений квазиимпульса φ от нижней точки верхней спектральной зоны $\varphi = \pi/2$. Это разложение определяется рядом Тейлора для экспонент после замены переменных $\alpha(\varphi - \pi/2) \rightarrow p$,

$$Q(\varphi) = \begin{pmatrix} q_0 + \frac{\delta}{\sqrt{2}} & \frac{\delta}{\sqrt{2}} + i\alpha \\ \frac{\delta}{\sqrt{2}} - i\alpha & q_0 - \frac{\delta}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip \\ ip & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \alpha \sum_{l=2}^{\infty} \frac{(-ip)^l}{l! \alpha^l} \\ \alpha \sum_{l=2}^{\infty} \frac{(ip)^l}{l! \alpha^l} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

После соответствующего преобразования спектральной переменной $\lambda \rightarrow \mu := \lambda - q_0$ мы получаем новый оператор

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= Q - q_0 E = \sigma_y p + \frac{\delta}{\sqrt{2}} \sigma_z + \left(\frac{\delta}{\sqrt{2}} + \alpha \right) \sigma_x + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 & \alpha(e^{-ip/\alpha} - 1 + ip/\alpha) \\ \alpha(e^{ip/\alpha} - 1 - ip/\alpha) & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \mathcal{D}_0 + \begin{pmatrix} 0 & \alpha(e^{-ip/\alpha} - 1 + ip/\alpha) \\ \alpha(e^{ip/\alpha} - 1 - ip/\alpha) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Его основная часть $\sigma_y p$ имеет спектр $\sigma_{\mathcal{D}}$ с центром в начале координат, $\sigma_{\mathcal{D}} = \{\mu : q_0 + \mu \in \sigma_Q\}$. Видно, что последние слагаемые в выражении для оператора $\mathcal{D}$ вблизи нуля имеют порядок p^2 . На самом деле малые значения p играют важную роль в процессах проводимости при низкой температуре и слабом напряжении U . Действительно,

предполагая, что разность потенциалов U является малой и температура T низкой, мы можем ввести новую норму в пространстве спектрального представления оператора $\mathcal{D}$:

$$\langle u, v \rangle = \int u \bar{v} [f(E, E_F + U) - f(E, E_F - U)] dE.$$

При сделанных предположениях весовая функция в этой норме, которая является комбинацией распределений Ферми, оказывается практически ступенчатой функцией Π_Δ . Она локализована в малом интервале Δ , $|\Delta| \approx \kappa T + 2eU$, вблизи уровня Ферми. В частности, предполагая, что уровень Ферми совпадает с дном верхней спектральной зоны, т.е.

$$E_F = Q_0 + [\delta^2 + \alpha^2 - \alpha\delta\sqrt{2}]^{1/2},$$

и вводя квазиимпульс φ вместо энергии $\lambda = E$, мы видим, что сужение оператора $\mathcal{D}$ на спектральное подпространство, отвечающее ступенчатой функции Π_Δ , отличается от $\mathcal{D}_0$ – преобразования Фурье оператора Дирака – только малой добавкой

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha(e^{-ip/\alpha} - 1 + ip/\alpha) \\ \alpha(e^{ip/\alpha} - 1 - ip/\alpha) & 0 \end{pmatrix}$$

с нормой, не превосходящей $|\alpha|^{-1}\Delta^2$. Суммируя сделанные выше наблюдения, мы получаем важное утверждение.

ТЕОРЕМА 1. *Динамика электронов в квазиодномерной решетке, составленной из сильно взаимодействующих двумерных блоков с большим расщеплением энергетических уровней, при низкой температуре и слабых полях описывается квазирелятивистским уравнением, если уровень Ферми находится на дне верхней спектральной зоны.*

Это утверждение согласуется с физическими наблюдениями квазирелятивистского поведения электронов в некоторых полупроводниках. Далее мы увидим, что такой же результат для эффективной массы может быть получен в совершенно другой ситуации.

Узкозонные сверхрешетки. Рассмотрим двойную сверхрешетку, составленную из двух параллельных слабо взаимодействующих ветвей с равными периодами. Каждая ветвь состоит из одинаковых квантовых точек (атомов или квазимолекулярных комплексов) с незаполненными нормированными орбиталями $\psi_l = \psi(x - le)$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $\varphi_m = \phi(x - me)$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Мы будем использовать следующее предположение об интегралах перекрытия:

$$\begin{aligned} \langle \psi_l, \psi_{l'} \rangle = \langle \varphi_l, \varphi_{l'} \rangle &= 0, & \text{если } |l - l'| \geq 2, \\ \langle \varphi_l, \psi_{l'} \rangle &= 0, & \text{если } l \neq l', \\ \langle \varphi_l, \varphi_{l+j} \rangle &= a_j, & \text{если } j = 0, \pm 1, \quad a_0 = 1, \quad a_1 = a_{-1} > 0, \\ \langle \psi_l, \psi_{l+j} \rangle &= b_j, & \text{если } j = 0, \pm 1, \quad b_0 = 1, \quad b_1 = b_{-1} < 0, \\ \langle \psi_l, \varphi_l \rangle &= \alpha = \bar{\alpha}. \end{aligned} \quad (8)$$

Предположим также, что одноэлектронный гамильтониан сверхрешетки представляется в виде суммы двух слабо взаимодействующих цепочек квантовых точек,

$$\mathcal{H}u = A \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \varphi_l \langle u, \varphi_l \rangle + A \sum_{l'=-\infty}^{+\infty} \psi_{l'} \langle u, \psi_{l'} \rangle. \quad (9)$$

Формальное собственное значение A , отвечающее незанятой орбитали, предполагается совпадающим с уровнем Ферми сверхрешетки в целом. Мы можем считать, что $A = 1$, поскольку оно дает только дополнительный сомножитель при описании спектра. Взаимодействие α предполагается слабым, $|\alpha| \ll 1$, по сравнению с уровнем Ферми и интегралами перекрытия a_l, b_m .

Найдем спектр сверхрешетки и вычислим соответствующие блоховские волны и эффективную массу. Блоховские волны будем искать в виде

$$u = \sum_{l=-\infty}^{\infty} u_l^\varphi \varphi_l + u_l^\psi \psi_l.$$

Подстановка данного анзаца в построенный гамильтониан дает бесконечную систему линейных уравнений

$$\begin{aligned} a_1 u_{l-1}^\varphi + a_1 u_{l+1}^\varphi + a_0 u_l^\varphi + \alpha u_l^\psi &= \lambda u_l^\varphi, \\ b_1 u_{l-1}^\psi + b_1 u_{l+1}^\psi + b_0 u_l^\psi + \alpha u_l^\varphi &= \lambda u_l^\psi. \end{aligned} \quad (10)$$

Решения типа блоховских волн определяются свойством

$$\begin{pmatrix} u_l^\varphi \\ u_l^\psi \end{pmatrix} := \vec{u}_l = \Theta \vec{u}_{l-1},$$

которое дает следующее уравнение для базисного вектора $\vec{u}_0$:

$$\left\{ \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & b_1 \end{pmatrix} [\Theta + \Theta^{-1}] + \begin{pmatrix} a_0 & \alpha \\ \alpha & b_0 \end{pmatrix} + \lambda I \right\} \vec{u}_0 = 0. \quad (11)$$

Блоховская экспонента может быть найдена из условия

$$\det \left\{ \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & b_1 \end{pmatrix} [\Theta + \Theta^{-1}] + \begin{pmatrix} a_0 & \alpha \\ \alpha & b_0 \end{pmatrix} + \lambda I \right\} = 0.$$

Мы продолжим вычисления, предположив, что $a_1 = 1 = -b_1$ и $a_0 = b_0$. Тогда для квазиимпульса p , $\Theta = e^{ip}$, получится простое алгебраическое уравнение

$$(a_0 - \lambda)^2 - 4(\cos p)^2 = \alpha^2.$$

Спектр гамильтониана (9) состоит из двух спектральных зон, разделенных лакуной $(-\alpha, \alpha)$. Центру лакуны отвечают значения квазиимпульса $p_0 = \pi/2$ и энергии $\lambda_0^\pm = a_0 \pm \alpha$; таким образом, лакуна является *узкой*, если взаимодействие между ветвями сверхрешетки *слабое*. С другой стороны, прямое вычисление эффективной массы дает следующий результат:

$$2(\lambda_0^\pm - a_0)\lambda_{pp} = 8(\sin p_0)^2, \quad (12)$$

следовательно, масса $m_{\text{eff}} = (\lambda_{pp})^{-1} = \alpha/4$ является малой. Это хорошо согласуется с наблюдениями свойства узкозонности для слабо связанных сверхрешеток, в частности для нестабильных полупроводников, подобных HgTe [8]. Анализ оператора в инвариантном подпространстве, отвечающем малой окрестности уровня Ферми на дне верхней спектральной зоны, обнаруживает квазирелятивистские свойства динамики электронов при условии $\kappa T + 2eU \ll 1$ аналогично случаю, рассмотренному выше.

3. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА С БЕГУЩИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Квазирелятивистский характер динамики электронов, отмеченный в предыдущем разделе, позволяет предложить способ управления квантовым током через проволоку с использованием бегущей волны. Этот способ аналогичен предложенному в работах [9], [10].

Рассмотрим нестационарное уравнение Дирака с бегущим потенциалом $\epsilon_1 \cos \epsilon_2(x - vt)$:

$$\frac{1}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} i \frac{\partial \psi}{\partial x} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi + (q_0 + \epsilon_1 \cos \epsilon_2(x - vt)) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \psi. \quad (13)$$

Следуя [10], применим преобразование Лоренца

$$\frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} = s, \quad \frac{t - vx}{\sqrt{1 - v^2}} = \tau \quad (14)$$

и получим новое уравнение

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{iv}{\sqrt{1-v^2}} \\ -\frac{iv}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} \end{pmatrix} i \frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \begin{pmatrix} \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{-i}{\sqrt{1-v^2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} \end{pmatrix} i \frac{\partial \psi}{\partial s} + \\ + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi + (q_0 + \epsilon_1 \cos \epsilon_2 \sqrt{1 - v^2} s) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \psi, \quad (15)$$

которое допускает разделение переменных. Введя спектральную переменную Ω и представив ψ в виде $\psi = e^{i\Omega\tau} \varphi_\Omega$, получим спектральную задачу

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{iv}{\sqrt{1-v^2}} \\ -\frac{iv}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} \end{pmatrix} \Omega \varphi_\Omega = \begin{pmatrix} \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{-i}{\sqrt{1-v^2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} \end{pmatrix} i \frac{\partial \varphi_\Omega}{\partial s} + \\ + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varphi_\Omega + (q_0 + \epsilon_1 \cos \epsilon_2 \sqrt{1 - v^2} s) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \varphi_\Omega := L \varphi_\Omega. \quad (16)$$

Дифференциальный оператор L , который отвечает этой спектральной задаче в соответствующем весовом пространстве всех квадратично интегрируемых функций, имеет периодические коэффициенты и зонный спектр σ_L . Следовательно, уравнение (13) также имеет решения в виде бегущей волны

$$e^{i\Omega \frac{t-vx}{\sqrt{1-v^2}}} \varphi_\Omega \left(\frac{x-vt}{\sqrt{1-v^2}} \right)$$

для $\Omega \in \sigma_L$, параметризованные точками спектра Ω .

4. ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ПО ВРЕМЕНИ УРАВНЕНИЕ ДИРАКА

Другая возможность управления квантовым током может быть получена с использованием локализованного периодического возбуждения. Рассмотрим оператор Дирака с сингулярным периодическим по времени потенциалом, определенным как расширение невозмущенного оператора Дирака, суженного (с D на D_0) на множество всех W_2^1 -гладких вектор-функций, обращающихся в нуль в окрестности точки $x = 0$. Сопряженный оператор D_0^+ определен на кусочно-непрерывных W_2^1 -гладких вектор-функциях $\vec{\psi} = (\psi_1, \psi_2)$, которые могут иметь точки разрыва в начале координат, т.е. левый предел $\vec{\psi}(-0) := (\psi_1^-, \psi_2^-)$ не совпадает с правым пределом $\vec{\psi}(+0) := (\psi_1^+, \psi_2^+)$. Непосредственные вычисления граничной формы оператора D_0^+ дают следующий результат для любого элемента $\vec{\psi}, \vec{\phi}$ из области определения сопряженного оператора:

$$\langle D_0^+ \vec{\psi}, \vec{\phi} \rangle - \langle \vec{\psi}, D_0^+ \vec{\phi} \rangle = i(\psi_1^- \bar{\phi}_2^- + \psi_2^- \bar{\phi}_1^-) - i(\psi_1^+ \bar{\phi}_2^+ + \psi_2^+ \bar{\phi}_1^+). \quad (17)$$

Отсюда вытекает следующее описание [11] граничного условия, определяющего самосопряженные расширения D_Γ оператора D_0 , параметризованные эрмитовыми (2×2) -матрицами Γ :

$$\begin{pmatrix} i\psi_1^- \\ \psi_2^+ \end{pmatrix} = \Gamma \begin{pmatrix} \psi_2^- \\ -i\psi_1^+ \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Ниже мы опустим векторные обозначения $\vec{\psi}$, имея в виду, что каждый раз, когда нижний индекс, например $\psi_{1,2}$, отсутствует, мы имеем 2-вектор, а именно, $\psi \equiv \vec{\psi}$.

Спектральные свойства оператора D_Γ легко определяются в терминах матриц Γ . Действительно, решения невозмущенного однородного уравнения можно представить в форме

$$\psi^\pm = \begin{pmatrix} \pm i \sqrt{\frac{\lambda - q_0 + \delta}{\lambda - q_0 - \delta}} e^{i \pm \sqrt{(\lambda - q_0)^2 - \delta^2} x} \\ e^{i \pm \sqrt{(\lambda - q_0)^2 - \delta^2} x} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Решения возмущенного уравнения, которые удовлетворяют граничным условиям (18), могут быть скомбинированы из $\psi^\pm$:

$$\begin{aligned} \vec{\psi} &= \begin{cases} \psi^+ + \overleftarrow{R} \psi^- & \text{при } x < 0, \\ \overrightarrow{T} \psi^+ & \text{при } x > 0, \end{cases} \\ \overleftarrow{\psi} &= \begin{cases} \psi^- + \overrightarrow{R} \psi^+ & \text{при } x > 0, \\ \overleftarrow{T} \psi^- & \text{при } x < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$

Тогда матрица рассеяния оператора D_Γ может быть определена как

$$S_\Gamma = \begin{pmatrix} \overleftarrow{R} & \overleftarrow{T} \\ \overrightarrow{T} & \overrightarrow{R} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Значения коэффициентов прохождения $\overleftrightarrow{T}$ не зависят от нормировочных постоянных, т.к. остаются инвариантными по отношению к замене $\psi^\pm$ на $|\alpha|e^{\pm i\varphi}\psi^\pm$. При специальном выборе нормировочных констант $|\alpha|e^{\pm i\varphi}$ матрица рассеяния будет унитарной. При этом для наших целей удобнее вычислять только коэффициенты прохождения. Справедлива следующая

ТЕОРЕМА 2. *Матрица рассеяния оператора D_Γ по отношению к решениям $\psi^\pm$ имеет вид*

$$S_\gamma = \left\{ \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \end{pmatrix} \right\}^{-1} \times \\ \times \left\{ \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Доказательство можно получить непосредственным вычислением коэффициентов прохождения и отражения из граничного условия (18) для $\overleftrightarrow{\psi}$:

$$\begin{pmatrix} \overleftarrow{T} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \\ 1 + \overrightarrow{R} \end{pmatrix} = \Gamma \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} + \overrightarrow{R} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} + \overleftarrow{R} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \\ \overrightarrow{T} \end{pmatrix} = \Gamma \begin{pmatrix} \frac{1 + \overleftarrow{R}}{\overrightarrow{T} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}}} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Последнее уравнение имеет решение

$$\begin{pmatrix} \overleftarrow{R} \\ \overrightarrow{T} \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \end{pmatrix} \right\}^{-1} \times \\ \times \left\{ \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \Gamma \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{\lambda-q_0+\delta}{\lambda-q_0-\delta}} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично можно записать решение уравнения (23). Комбинация обоих решений дает объявленный результат. Теорема 2 доказана.

Рассмотрим теперь уравнение Дирака с зависящим от времени сингулярным потенциалом как самосопряженный оператор в пространственно-временном гильбертовом пространстве $L_2(R) \times L_2(R, E)$, который получается как расширение “невозмущенного” оператора

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} i \frac{\partial \psi}{\partial x} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi := \mathcal{D},$$

суженного $\mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}_0$ на линейное множество всех W_2^1 -функций, исчезающих вблизи оси t в фазовом пространстве $R_2 = R_t \times R_x$. Соответствующий сопряженный оператор определяется в расщепленном пространстве $W_2^1(R_2, t < 0) \oplus W_2^1(R_2, t > 0)$, его граничная форма может быть записана как интеграл от граничных форм (17) оператора D_0^+ по R_t :

$$\langle D_0^+ \vec{\psi}, \vec{\phi} \rangle - \langle \vec{\psi}, D_0^+ \vec{\phi} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \{i(\psi_1^- \bar{\phi}_2^- + \psi_2^- \bar{\phi}_1^-) - i(\psi_1^+ \bar{\phi}_2^+ + \psi_2^+ \bar{\phi}_1^+)\} dt.$$

Существование граничных значений $\psi_{1,2}^\pm \in L_2(R_t)$ следует из стандартных теорем вложения. Для того чтобы определить самосопряженные расширения $\mathcal{D}_\Gamma$, подчиним граничные значения $\psi_{1,2}^\pm$ *локальному* граничному условию, зависящему от времени,

$$\begin{pmatrix} i\psi_1^- \\ \psi_2^+ \end{pmatrix} = \Gamma \cos \Omega t \begin{pmatrix} \psi_2^- \\ -i\psi_1^+ \end{pmatrix}, \quad (25)$$

с постоянной эрмитовой матрицей Γ . Решения однородного уравнения

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} i \frac{\partial \psi}{\partial x} + \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \psi = \Lambda \psi \quad (26)$$

служат собственными функциями оператора $\mathcal{D}_\Gamma$. Можно показать, что спектр этого оператора в целом является абсолютно непрерывным и состоит из двух ветвей. Одна ветвь – с бесконечной кратностью – отвечает рассеянным волнам, составленным из решений невозмущенного однородного уравнения

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_\Omega(t) \partial t = \Omega \psi_\Omega(t), \\ D \psi_\lambda^\pm = \lambda \psi_\lambda^\pm$$

при $\Lambda = \Omega + \lambda$:

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}_{\Lambda, \Omega} &= \psi_\Omega(t) \times \begin{cases} \psi_\lambda^+ + \overleftarrow{\mathcal{R}} \psi^- & \text{при } x < 0, \\ \overrightarrow{\mathcal{T}} \psi^- & \text{при } x > 0, \end{cases} \\ \overleftarrow{\Psi}_{\Lambda, \Omega} &= \psi_\Omega(t) \times \begin{cases} \psi^- + \overrightarrow{\mathcal{R}} \psi^+ & \text{при } x > 0, \\ \overleftarrow{\mathcal{T}} \psi^- & \text{при } x < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (27)$$

Вторая волноводная ветвь отвечает уходящим на оси x решениям

$$\Psi_\Lambda(x, t) = \psi_\Omega(t) \times \begin{cases} \psi^+(x) & \text{при } x > 0, \\ \mathcal{K} \psi^-(x) & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (28)$$

Коэффициенты прохождения и отражения $\overleftarrow{\mathcal{T}}, \overleftarrow{\mathcal{R}}$ при заданном λ по-прежнему зависят от Ω и могут быть определены из граничного условия (25). Из них можно построить матрицу рассеяния

$$S_\Gamma(\Lambda, \Omega) = \begin{pmatrix} \overleftarrow{\mathcal{R}} & \overleftarrow{\mathcal{T}} \\ \overrightarrow{\mathcal{T}} & \overrightarrow{\mathcal{R}} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Амплитуды $\mathcal{K}$ при заданном λ определяются однозначно из дополнительного условия квазипериодичности по временной переменной

$$\Psi_{\Lambda} \left(x, t + \frac{2\pi}{\Omega} \right) = \Theta \Psi_{\Lambda}(x, t),$$

которое может быть учтено прямо в граничных значениях $\Psi_{\Lambda}(\pm 0, t)$. Экспонента от квазиимпульса $\Theta(\Lambda)$ может играть роль альтернативной спектральной переменной для волноводной ветви абсолютно непрерывного спектра. Такая же спектральная переменная может быть введена и в случае рассеянных волн $\overline{\overline{\Psi}}_{\Lambda, \Omega}$ для замены одного из параметров Λ, Ω .

Проанализируем теперь собственные функции абсолютно непрерывного спектра, которые соответствуют точке $\Lambda = 0$. Эти собственные функции отвечают уравнению $\mathcal{D}_{\gamma} \Psi = 0$. В частности, собственные функции волноводного типа (если они существуют) могут соответствовать в каком-то смысле основному состоянию, которое зависит от времени гармонически. Для исследования проводимости квантового канала узкозонного полупроводника, управляемого локализованным периодическим по времени возмущением, важную роль играют рассеянные волны $\overline{\overline{\Psi}}_{\Lambda, \Omega}$. Точнее говоря, проводимость для заданного Ω вычисляется по соответствующему коэффициенту прохождения при помощи формулы Ландауэра как

$$\frac{e^2}{h} \frac{|\mathcal{T}(0, \Omega)|^2}{1 - |\mathcal{T}(0, \Omega)|^2}.$$

Исследование поведения коэффициента прохождения $\overrightarrow{\mathcal{T}}(0, \Omega)$ в зависимости от частоты возбуждения Ω является следующей важной проблемой.

Оценим частоту, необходимую для эффективного управления динамикой электронов в узкозонном полупроводнике указанным способом. Априори ясно, что частота необходимой модуляции должна быть того же порядка, что и частота падающих на управляющий центр электронов. Предполагая, что уровень Ферми совпадает с нижней границей зоны, вычислим частоту электронов ν_{el} при средней тепловой энергии электронов kT для температуры $T = 300\text{ К}$:

$$\nu_{el} = 2\pi \frac{kT}{h} \approx 3 \cdot 10^{13} \text{ Гц},$$

что соответствует длинам световых волн в хорошо освоенном инфракрасном диапазоне $\lambda \approx 10 \text{ мкм}$.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке гранта Университеты России.

Список литературы

- [1] *R. Landauer*. IBM J. for Research and Development. 1957. V. 1. P. 223–231.
- [2] *C. W. J. Beenakker, H. van Houten*. Quantum transport in semiconductor nanostructures. In: Solid State Physics. Advances in Research and Applications. V. 44. Eds. H. Ehrenreich, D. Turnbull. San Diego: Academic Press, 1991. P. 1–228.
- [3] *L. A. Girifalco*. Statistical Physics of Materials. New York–London–Sydney–Toronto: J. Wiley & Sons, 1973.
- [4] *Э. Ч. Тутчмарш*. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка. М.: ИЛ, 1960.
- [5] *Б. С. Павлов, Н. В. Смирнов*. Вестн. ЛГУ. 1977. Т. 13. № 3. С. 217–223.
- [6] *Б. С. Павлов, Г. П. Мирошниченко*. Резонансный квантовый транзистор. Патент 2062530 (Россия), 12.03.1992.
- [7] *B. S. Pavlov, G. Roach, A. Yafyasov*. Resonance scattering and design of quantum gates. In: Unconventional Models of Computations. Eds. C. S. Calude, J. Casti, M. J. Dinneen. Singapore: Springer, 1988. P. 336–351.
- [8] *I. Antononiou, B. Pavlov, A. Yafyasov*. Quantum electronic devices, based on metal-dielectric transmission in low-dimensional quantum structures. In: Combinatorics, Complexity, Logic, Proc. of DMTCS'96. Eds. D. S. Bridges, C. Calude, J. Gibbons, S. Reeves, I. Witten. Singapore: Springer, 1996. P. 90–104.
- [9] *B. S. Pavlov, A. A. Pokrovski, L. V. Prokhorov*. Light propagation in truncated periodic waveguide. Progress Report (July 1, 1998 – December 31, 1998) ESPRIT Project 28890 NTCONGS.
- [10] *B. S. Pavlov, A. A. Pokrovski, L. V. Prokhorov*. Quasi-stationary analysis of the effective fiber acoustooptic equation. Progress Report (January 1, 1999 – June 31, 1999) ESPRIT Project 28890 NTCONGS.
- [11] *Б. С. Павлов*. УМН. 1987. Т. 42. № 6. С. 99–131.