

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

Н.К.БАЛАБАЕВ, В.Д.ЛАХНО, А.М.МОЛЧАНОВ

**ВОЗБУЖДЕННЫЕ
САМОСОГЛАСОВАННЫЕ
СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ
В ГОМЕОПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

ПУЩИНО • 1983

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

ПРЕПРИНТ

Н.К.БАЛАБАЕВ, В.Д.ЛАХНО, А.М.МОЛЧАНОВ

**ВОЗБУЖДЕННЫЕ
САМОСОГЛАСОВАННЫЕ
СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ
В ГОМЕОПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

ПУЩИНО • 1983

УДК 539.21

В работе изучаются возбужденные самосогласованные состояния электрона в гомополярном кристалле. Проводится сравнение с самосогласованными состояниями электрона и поляризации в ионном кристалле. Излагается алгоритм нахождения решений возникающей краевой задачи для сферически-симметричного случая. Приводятся несколько первых решений этой задачи.

Введение

В работе /1/ авторами были рассмотрены возбужденные самосогласованные состояния электрона и поляризации в ионном кристалле (полярон сильной связи). Мы покажем, что, в некотором смысле, аналогичная ситуация имеет место в гомеополярных кристаллах, где основным является взаимодействие электронов с упругой деформацией. Более того, с математической точки зрения ситуация с возбужденными самосогласованными состояниями в гомеополярном кристалле даже проще, чем в ионном кристалле. Тот факт, что на возможность возбужденных самосогласованных состояний в гомеополярных кристаллах долгое время не обращали внимания, связан с тем, что для свободного электрона полная энергия таких состояний положительна, то есть попадает в область непрерывного спектра, и, как следствие, эти состояния оказываются неустойчивыми. Ввиду глубокой аналогии между самосогласованными состояниями в теории полярона и самосогласованными состояниями в гомеополярном кристалле представляется необходимым дать более детальное исследование таких состояний.

Изучение самосогласованных состояний представляет интерес и с практической точки зрения. В качестве приложений достаточно указать на их важную роль в кристаллах с примесями, когда электрон (дырка), локализованный в окрестности донора (акцептора), образует самосогласованные состояния с отрицательной полной энергией. Эти вопросы будут нами рассмотрены в последующих публикациях.

Рассматриваемые в работе уравнения в предельном случае сильной связи электронов с колебаниями решетки являются асимптотически точными. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, авторы сочли целесообразным привести последовательный как полуклассический, так и квантовомеханический вывод этих уравнений.

§ 1. Полуклассическое описание электрона в гомеополярном кристалле

Для вывода динамических уравнений, описывающих совместное

движение электрона и деформации, удобно воспользоваться лагранжевым формализмом. Следуя /2/, будем описывать взаимодействие электрона с деформацией кристалла посредством деформационного потенциала. Тогда полный лагранжиан всей системы имеет вид:

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\Psi^* \dot{\Psi} - \dot{\Psi}^* \Psi) - \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla \Psi^*, \nabla \Psi) + G \Psi^* U_{ee} \Psi + \rho \frac{\ddot{U}}{2} - \mu (U_{ik} - \frac{1}{3} \delta_{ik} U_{ee})^2 - \frac{K}{2} U_{ee}^2. \quad (1)$$

Здесь первая строчка представляет плотность лагранжиана электрона, взаимодействующего с деформацией, причем G – константа деформационного потенциала. Вторая строчка представляет обычную плотность лагранжиана поля упругих напряжений изотропного кристалла с тензором деформации U_{ik} . В такой записи ρ – плотность кристалла, K и μ – модули всестороннего сжатия и сдвига, соответственно, U_{ee} – след тензора деформации.

Уравнения движения, соответствующие лагранжиану (1), имеют вид:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} - \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \Psi^*} = 0 \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{U}} - \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta U} = 0. \quad (2)$$

Таким образом, независимыми обобщенными координатами здесь являются волновая функция электрона Ψ , Ψ^* и вектор деформации \vec{U} . С использованием (1) и (2) получаем следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\Psi} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi + G U_{ee} \Psi &= 0 \\ -\rho \ddot{\vec{U}} + \frac{E}{2(1+\phi)} \Delta \vec{U} + \\ + \frac{E}{2(1+\phi)(1-2\phi)} \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{U} - G \operatorname{grad} |\Psi|^2 &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где введены следующие обозначения: ϕ – коэффициент Пуассона, E – модуль Юнга, Δ – оператор Лапласа.

Будем искать стационарные решения (3) в виде:

$$\begin{aligned} \Psi &= \exp \left(\frac{it}{\hbar} \left(\frac{m^* v^2}{2} - W \right) \right) \exp \left(\frac{im^* \vec{v}}{\hbar} (\vec{r} - \vec{v}t) \right) \psi(\vec{r} - \vec{v}t) \\ \vec{U} &= \vec{U}(\vec{r} - \vec{v}t), \end{aligned} \quad (4)$$

* В /2/ за обобщенные координаты ошибочно выбраны компоненты тензора деформации U_{ik} .

которые описывают движение электрона и поля со скоростью \vec{U} . Вид решения (4) отвечает солитону, движущемуся со скоростью \vec{U} , причем W имеет смысл энергии электрона в покоящейся системе отсчета. Подставляя (4) в (3), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi + G u_{\ell\ell} \Psi + W \Psi &= 0 \\ -\rho (\vec{v} \vec{\nabla})^2 \vec{U} + \frac{E}{2(1+\phi)} \Delta \vec{U} + \\ + \frac{E}{2(1+\phi)(1-2\phi)} \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{U} - G \operatorname{grad} |\Psi|^2 &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

В дальнейшем мы ограничимся случаем предельно малых скоростей: $v \rightarrow 0$. Будем искать сферически-симметричные решения системы уравнений (5), удовлетворяющие условиям ограниченности деформации в нуле и обращению в нуль на бесконечности. Тогда второе из системы уравнений (5) дает:

$$\vec{U} = \frac{Q}{4\pi} \frac{\vec{r}}{r^3} \int_0^r |\Psi|^2 dv, \quad Q = \frac{(1+\phi)(1-2\phi)}{E(1-\phi)} G. \quad (6)$$

Подставляя (6) в первое из уравнений (5), окончательно получаем уравнение для определения волновой функции электрона Ψ и энергии W :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi + \frac{3G^2}{3\kappa + 4\mu} |\Psi|^2 \Psi + W \Psi = 0 \quad (7)$$

с граничными условиями:

$$\Psi(0) = \Psi(\infty) = 0. \quad (7)$$

Свойства решений уравнения (7), (7) будут подробно рассмотрены ниже. Для полноты рассмотрения нам необходимо получить выражения для полной энергии и массы частицы. Для этого введем обобщенные импульсы по формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_e &= \delta \mathcal{L} / \delta \dot{\psi} = \frac{i\hbar}{2} \Psi^* \\ \tilde{\Pi}_e^* &= \delta \mathcal{L} / \delta \dot{\psi}^* = -\frac{i\hbar}{2} \Psi \\ \tilde{\Pi}_{ph} &= \delta \mathcal{L} / \delta \dot{\vec{U}} = \rho \dot{\vec{U}}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\tilde{\Pi}_e$ и $\tilde{\Pi}_{ph}$ - импульсы электрона и поля соответственно. Тогда плотность гамильтонiana по определению имеет вид:

$$\mathcal{H} = \tilde{\Pi} \dot{\psi} + \tilde{\Pi}^* \dot{\psi}^* + \tilde{\Pi}_{ph} \dot{\vec{U}} - \mathcal{L} = \frac{\hbar}{2m^*} (\nabla \Psi^*, \nabla \Psi) - \quad (9)$$

$$-\mathcal{G}\psi^*\psi_{\ell\ell}\psi + \frac{\rho\bar{U}^2}{2} + \mu(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{\ell\ell})^2 + \frac{k}{2}u_{\ell\ell}^2.$$

Из выражения для полной энергии: $\mathcal{E} = \int \mathcal{H} dV$ при малых \bar{U} легко находим эффективную массу частицы, которая определяется как коэффициент в разложении: $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + m^{**}\bar{U}^2/2 + \dots$. Согласно (4) и (9) она равна:

$$m^{**} = m^* + \rho \int \left(\frac{\partial \bar{U}(\vec{r})}{\partial (\vec{r} \cdot \vec{v}_n)} \right)^2 dV, \quad \vec{v}_n = \vec{v}/|\vec{v}|. \quad (10)$$

С учетом (6) выражение (10) можно переписать в виде, удобном для дальнейшего употребления:

$$m^{**} = m^* + \frac{\rho Q^2}{3} \int |\psi|^4 dV. \quad (11)$$

§ 2. Квантовое описание электрона в гомеополярном кристалле

Рассматривая поле упругих напряжений \bar{U} как квантовое, приходим к квантовой задаче с гамильтонианом /3/:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p + \mathcal{H}_v + \mathcal{H}_{int}, \quad (12)$$

где:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_p &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_r, \quad \mathcal{H}_v = \frac{1}{2} \sum_f \hbar \omega_f (b_f b_f^\dagger + b_f^\dagger b_f) \\ \mathcal{H}_{int} &= \sum_f \left\{ u_f e^{i(f r)} b_f + u_f^* e^{-i(f r)} b_f^\dagger \right\} \\ u_f &= Gf \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V \omega_f}}, \quad \omega_f = \frac{1}{2} \sqrt{(k + \frac{4}{3}\mu)/\rho}. \end{aligned} \quad (12')$$

Здесь ρ – плотность кристалла, $\frac{1}{2}$ – скорость звука; b_f^\dagger , b_f – операторы рождения и уничтожения акустических фононов в состоянии f . \mathcal{H}_p , \mathcal{H}_v , \mathcal{H}_{int} – гамильтонианы свободного электрона, свободного фононного поля и электрон–фононного взаимодействия, соответственно.

Решение задачи (12), (12') в пределе слабой связи, когда \mathcal{H}_{int} можно рассматривать как возмущение, приведено в /3/. В противоположном случае сильной связи электрона с упругими колебаниями, когда \mathcal{H}_{int} нельзя рассматривать как возмущение, решение задачи в общем виде было дано в работе /4/. Согласно /4/, в предельном случае сильной связи уравнение для электронной части волновой функции имеет вид:

$$6 \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(r) - W \right) \Psi(r) = 0 \quad (13)$$

$$U(\tau) = - \sum_{\ell} \frac{2|\psi_{\ell}|^2}{\omega_{\ell}} \int e^{i(\ell\tau) - i(\ell\tau')} |\psi(\tau')|^2 d\vec{\tau}'.$$

Учитывая, что:

$$\frac{1}{V} \sum_{\ell} e^{i\ell(\tau - \tau')} = \delta(\tau - \tau'), \quad (14)$$

из (14) получим уравнение (7), выведенное в предположении, что упругие напряжения можно рассматривать классически. Причина такого совпадения хорошо известна — в пределе сильной связи число акустических фононов, связанных с деформацией электроном кристалла, стремится к бесконечности. Вследствие этого операторы рождения и уничтожения фононов b^+ , b можно рассматривать как классические Фурье-компоненты вектора деформации \vec{U} .

В заключение этого раздела отметим, что полученное в /4/ в пределе малых скоростей выражение для эффективной массы m^{**} :

$$m^{**} = m^* + 2\hbar^2 \sum_{\ell} \frac{u_{\ell} f_{\ell}^2}{\omega_{\ell}^2} \left| \int \psi^* e^{i\ell\tau} \psi dV \right|^2 \quad (15)$$

приводит (с учетом соотношений (12), (14)) к ранее найденному значению (11)

§ 3. Свойства самосогласованных состояний

Как показано в дополнении, задача (7), ($7'$) имеет дискретный набор сферически-симметричных решений, которые устроены сле-

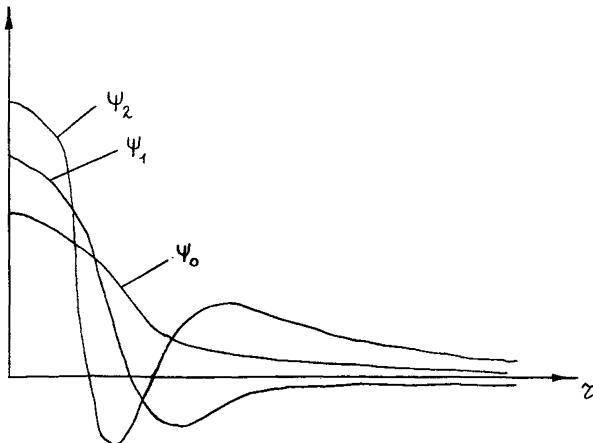


Рис. 1. Первые три моды задачи (7), ($7'$)

дующим образом: первое решение (нулевая мода) соответствует случаю, когда функция $\Psi(\chi)$ не имеет узлов (основное состояние); второе решение, когда $\Psi(\chi)$ имеет один узел (первая мода) и так далее (см. рис. 1). Из (7), (7') и (11) следует, что для любого из полученных решений выражения для энергии электрона и массы частицы имеют вид:

$$|W_n| = (4\pi \Gamma_n)^2 \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^3 \frac{1}{Q^2 G^2} \quad (16)$$

$$m_n^{**} = m^* + \frac{4}{3} \frac{Q}{G} \rho |W_n| , \quad (17)$$

где n – номер решения. Коэффициенты Γ_n в (16) для первых четырех состояний равны (см. дополнение):

$$\Gamma_0 = 1,507; \quad \Gamma_1 = 9,477; \quad \Gamma_2 = 28,70; \quad \Gamma_3 = 63,94 \quad (18)$$

Таким образом, из (16)-(18) вытекает, что с ростом номера состояния энергия электрона понижается и стремится к $-\infty$ при $n \rightarrow \infty$. При этом состояния с большим номером лежат по энергии ниже состояний с меньшим номером. Это свойство решений не противоречит общему утверждению, что возбужденные состояния с большими n должны лежать по энергии выше состояний с меньшим номером, поскольку сказанное относится только к электронной энергии W_n , которая в силу теоремы вириала связана с полной энергией частицы (то есть энергией электрона плюс деформация кристалла) соотношением: $-W_n = E_n$, где E_n – полная энергия. Таким образом, хотя энергия электрона и понижается при его взаимодействии с деформацией, его полная энергия увеличивается. Из (17) также следует, что масса частицы m^{**} растет с номером состояния и стремится к бесконечности при $n \rightarrow \infty$. Это означает, что при любых значениях параметров задачи можно так выбрать номер состояния, что полуклассическое описание электрона в кристалле окажется применимым с большой точностью *.

Следует отметить, что приведенные здесь результаты в принципе не могут быть получены методом теории возмущений с ис-

* В реальных кристаллах имеется дополнительное ограничение на возможность образования возбужденных самосогласованных состояний, связанное с тем, что величины $|W_n|$ не должны превосходить ширины запрещенной щели E_g , отделяющей зону проводимости от заполненной валентной зоны. Так, например, в Ge и Si $k, \mu \sim 10^{10} \div 10^{11} \text{ н/м}^2, G \sim 10 \text{ эв}, E_g \sim 4 \text{ эв}$. Таким образом, из (16) следует, что в этих кристаллах неравенство $|W_n| < E_g$ не выполняется уже для первого самосогласованного состояния.

пользованием исходного гамильтониана (12), (12¹) (такая попытка была предпринята в /8/), поскольку применимость метода теории возмущений ограничивается случаем, когда константа взаимодействия $G \rightarrow 0$ (при этом сдвиг в энергии электрона /4/: $W \sim G^2$ и стремится к нулю при $G \rightarrow 0$). Однако в случае $G \rightarrow 0$ одновременно выполняется и критерий сильной связи (согласно (16), (17): $|W| \sim G^{-4} \rightarrow \infty$ при $G \rightarrow 0$). Таким образом, при $G \rightarrow 0$ имеются два прямо противоположных способа описания электрона в деформируемой среде. С практической точки зрения рассматриваемые здесь состояния с положительной полной энергией для свободных электронов не могут играть существенной роли в реальных физических процессах. Однако они могут играть важную роль для связанных состояний электронов в гомеополярных кристаллах.

§ 4. Сравнение с поляронными самосогласованными состояниями

На наш взгляд, происхождение самосогласованных состояний в поляронной проблеме /1/ и состояний, рассмотренных в данной работе, имеют одинаковую природу. К сожалению, исследованная в /1/ система дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} y'' + \frac{2}{x} y' + z y - y &= 0 \\ z'' + \frac{2}{x} z' + y^2 &= 0 \end{aligned}$$

не допускает таких наглядных представлений, как уравнение (П2) в дополнении.

Интересно сравнить физические характеристики самосогласованных состояний электрона в ионном и гомеополярном кристаллах. В случае поляронов как полная, так и электронная энергия отрицательны, то есть лежат ниже дна зоны проводимости. Напротив, в рассмотренном здесь случае электрона в гомеополярном кристалле полная энергия каждого самосогласованного состояния положительна, в то время как электронная энергия (равная по абсолютной величине полной энергии) оказывается отрицательной. Таким образом, для электронов в гомеополярных кристаллах электронная энергия возбужденного самосогласованного состояния по энергии лежит ниже основного состояния (то есть состояния без узлов).

Значительное различие между двумя рассматриваемыми случаями имеется и в вопросе об эффективных массах самосогласованных состояний. В случае поляронов эффективная масса состояния быстро убывает с ростом номера n . В случае же состояний в гомеополярном кристалле масса состояния быстро растет с номером состояния.

В заключение отметим, что рассмотренное в работе уравнение (7) возникает в самых разнообразных задачах. Так, оно естеств-

венным образом появляется в нелинейной оптике, когда приходится учитывать зависимость показателя преломления от величины напряженности электромагнитного поля /5/, в задачах о движении электронов в кристаллах с неупорядоченным распределением примесей /6/, в нелинейной теории поля /7/ и т.д. Из сказанного следует, что результаты исследования уравнения (7), примененные нами для изучения проблем поведения электрона в гомеополярном кристалле, в действительности имеют более широкую область приложений.

Дополнение

Решение краевой задачи

Будем искать сферически симметричные решения $\Psi(\gamma)$ уравнения (7) с граничными условиями (7'). Перейдем к новым переменным:

$$\gamma = \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*|W|}} x, \quad \Psi(\gamma) = \frac{1}{G} \sqrt{|W| (\kappa + \frac{4}{3}\mu)} \cdot \psi(x). \quad (\text{П1})$$

Тогда вместо (7)–(7') будем иметь:

$$\psi'' + \frac{2}{x} \psi' + \psi^3 - \psi = 0 \quad (\text{П2})$$

$$\psi'(0) = 0; \quad \psi(\infty) = 0 \quad (\text{П3})$$

Покажем, что краевая задача (П2)–(П3) имеет ряд решений $\psi_n(x)$ ($n=0, 1, \dots$), таких, что функция $\psi_n(x)$ n раз пересекает ось x и стремится к нулю при $x \rightarrow \infty$.

п. 1. Асимптотика решений при малых x

Дифференциальное уравнение (П2) в точке $x=0$ имеет особенность: один из коэффициентов уравнения обращается в ∞ . Поэтому более правильно граничное условие на левом конце формулировать следующим образом: $\psi'(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$. Именно такой смысл записи в (П3) и имеется в виду.

Решение уравнения (П2) в окрестности точки $x=0$, удовлетворяющее граничному условию на левом конце, представим в виде:

$$\psi(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots \quad (\text{П4})$$

Подставляя (П4) в (П2), найдем, что все нечетные коэффициенты ряда (a_{2k+1} , $k=0, 1, \dots$) равны нулю, а все четные выражаются через $\psi(0) = y_0 = a_0$:

$$a_2 = \frac{1}{6} y_0 (1 - y_0^2) \quad (\text{П5})$$

$$a_4 = \frac{1}{120} y_0 (1 - y_0^2)(1 - 3y_0^2)$$

$$a_6 = \frac{1}{5040} y_0 (1 - y_0^2) (1 - 16 y_0^2 + 19 y_0^4)$$

· · · · ·

Покажем, что ряд (П4) при достаточно малых x сходится. Оценим радиус сходимости этого ряда в зависимости от значения параметра y_0 .

Теорема. Для четных коэффициентов ряда (П4) верна оценка:

$$|\alpha_{2k}| \leq \left(\frac{1}{4}\right)^k |y_0|^{2k+1}, \quad |y_0| \geq 1, \quad k=0, 1, \dots \quad (\text{П6})$$

Доказательство.

Для $k=0, 1, 2$ неравенство (П6) проверяется непосредственно, используя явные формулы для коэффициентов (П5). Для доказательства общего случая подставим (П4) в (П2), суммируем все коэффициенты при x^{2k-2} ($k > 2$) и приравняем эту сумму нулю. Имеем:

$$\underbrace{2k(2k-1)\cdot\alpha_{2k}}_{y''} + \underbrace{2\cdot2k\cdot\alpha_{2k}}_{2y'/x} + \underbrace{\sum_{i_1+i_2+i_3=2k-2} \alpha_{i_1}\alpha_{i_2}\alpha_{i_3}}_{y^3} - \underbrace{\alpha_{2k-2}}_{y} = 0 \quad (\text{П7})$$

(Под каждым слагаемым указан член уравнения (П2), из которого оно возникло).

Считая, что неравенство (П6) выполняется для коэффициентов α_{2k} при $s < k$, докажем его при $s=k$. Из (П7) имеем:

$$2k(2k+2)\cdot|\alpha_{2k}| \leq \frac{k(k+1)}{2} \left(\frac{1}{4}\right)^{k-1} |y_0|^{2k+1} + \left(\frac{1}{4}\right)^{k-1} |y_0|^{2k-1}$$

Или:

$$|\alpha_{2k}| \leq \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{k(k+1)y_0^2}\right) \cdot \left(\frac{1}{4}\right)^k \cdot |y_0|^{2k+1}.$$

Откуда при $k \geq 2$ и $|y_0| \geq 1$ следует (П6), что и требовалось доказать.

Следствие: Из неравенства (П6) для коэффициентов ряда (П4) следует, что этот ряд сходится, по крайней мере, в области $x \leq 4/y_0$, а скорость сходимости при данном x не меньше скорости сходимости геометрической прогрессии с показателем $q = |x \cdot y_0|/4$.

п. 2. Постановка задачи Коши

Представление в окрестности точки $x=0$ решений дифференциального уравнения (П2), удовлетворяющих краевому условию на левом конце (П3), в виде ряда (П4) и полученные оценки (П6) для коэффициентов ряда делают возможной постановку для уравнения (П2) задачи Коши на отрезке $[x_n, x_k]$, отвечающую гра-

ническому условию (П3) при $x=0$. Для этого при заданном значении параметра $\gamma_0 > 1$ следует взять $x_n \ll 4/|\gamma_0|$ и ограничиться несколькими первыми членами ряда (П4) для нахождения значений $y(x_n)$ и $y'(x_n)$. На отрезке $[x_0, x_k]$ уравнение (П2) уже не имеет особенностей и решение задачи Коши может быть легко найдено на ЭВМ одним из численных методов. Взяв x_k достаточно большим и меняя значение параметра γ_0 , можно пытаться приближению удовлетворить условию (П3) на правой границе.

На рис. 2 представлены решения задачи Коши для уравнения (П2) при последовательно возрастающих значениях параметра γ_0 . Из анализа зависимости поведения решений от γ_0 можно заключить, что существуют различные решения краевой задачи (П2)–(П3): решение, не пересекающее ось x ; пересекающее один раз; пересекающее два раза и т.д.

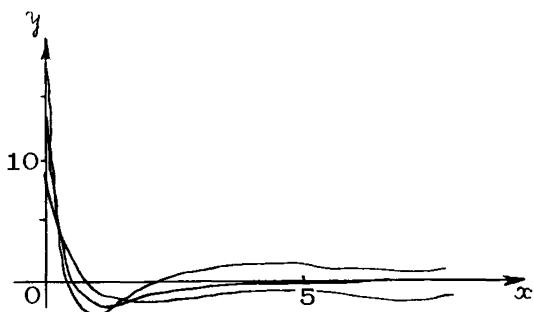
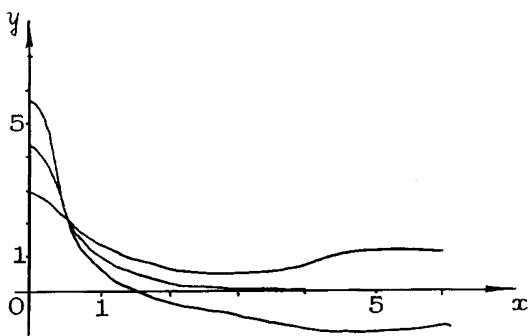


Рис. 2. Решения задачи Коши при разных γ_0

п. 3. Механическая аналогия

Уравнение (П2) перепишем в виде:

$$\left[\frac{(y')^2}{2} + \frac{y^4}{4} - \frac{y^2}{2} \right]' = -\frac{2}{x} (y')^2. \quad (\text{П8})$$

Выражение в квадратных скобках можно интерпретировать как энергию системы:

$$E(y, y') = \frac{(y')^2}{2} + \frac{y^4}{4} - \frac{y^2}{2} = \kappa(y') + \Pi(y). \quad (\text{П9})$$

Здесь $\kappa(y') = (y')^2/2$ – кинетическая энергия, а $\Pi(y) = y^4/4 - y^2/2$ – потенциальная энергия системы. Переменную x в таком случае следует интерпретировать как время.

Равенство (П8) означает, что энергия системы монотонно убывает (дифференциальное уравнение (П2) имеет функцию Ляпунова!). На рис. 3 изображен график потенциальной энергии системы (масштаб не соблюден). Функция $\Pi(y)$ имеет два минимума (при $y = \pm 1$) и один (локальный) максимум (при $y = 0$). На этом же рисунке изображены две кривые изменения полной энергии системы $E(y, y')$, соответствующие решениям задачи Коши, описанной в предыдущем пункте, с близкими значениями параметра y_0 .

Из рисунка видно, что при $x \rightarrow \infty$ одно из решений притягивается к точке $y = 1$, а другое – к $y = -1$. Решение, соответствующее промежуточному значению параметра y_0 , такое что траектория $E(y, y')$ касается потенциальной кривой $\Pi(y)$ в точке $y = 0$ является решением краевой задачи (П2)–(П3).

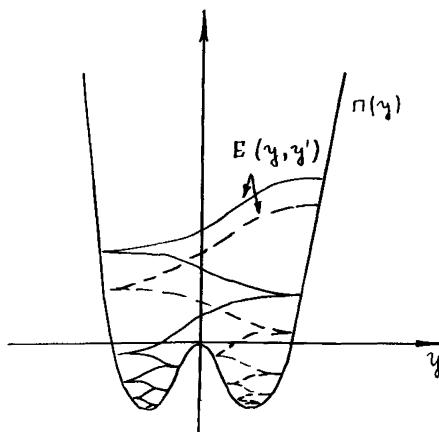


Рис. 3. (Пояснения в тексте)

п. 4. Алгоритм поиска решений

Решения краевой задачи (П2)-(П3) $y_n(x)$ для нескольких первых значений n находились нами последовательно, начиная с $n=0$. При этом использовались результаты, приведенные в предыдущих пунктах.

Поиск решения $y_n(x)$, равно n раз пересекающего ось x и стремящегося к нулю при $x \rightarrow \infty$, осуществлялся по следующей схеме:

а) устанавливался интервал $[y_{min}, y_{max}]$, внутри которого лежит значение параметра y_0 для данного решения; этот интервал на каждой итерации сужался ровно в два раза;

б) выбирался интервал $[x_n, x_k]$, на котором многократно решалась задача Коши для дифференциального уравнения (П2);

в) для значения параметра $y_0 = 0,5 \cdot (y_{max} + y_{min})$ вычислялись начальные данные для дифференциального уравнения (П2):

$$y(x_n) = y_0 + \frac{1}{6} y_0 (1 - y_0^2) \cdot x_n + \frac{1}{120} y_0 (1 - y_0^2) (1 - 3y_0^2) \cdot x_n^4 \quad (\text{П10})$$

$$y'(x_n) = \frac{1}{3} y_0 (1 - y_0^2) \cdot x_n + \frac{1}{30} y_0 (1 - y_0^2) (1 - 3y_0^2) \cdot x_n^3$$

г) уравнение (П2) с начальными данными (П10) интегрировалось на отрезке $[x_n, x_k]$; при этом вычислялось, сколько раз решение $y(x)$ пересекло ось x ;

д) если число пересечений оказывалось меньшим или равным n , то y_{min} принимало новое значение, равное y_0 , в противном случае y_{max} принимало это значение.

Пункты в) – д) повторялись до тех пор, пока величина $y_{max} - y_{min}$ не становилась меньше заданной величины ε (обычно $\varepsilon = 10^{-4}$). Первоначальное значение y_{max} задавалось таким, чтобы для $y_0 = y_{max}$ решение $y(x)$ пересекало ось x не менее $n+1$ раз. В качестве левой границы интервала интегрирования бралась величина 10^{-2} . Задание правой границы x_k также требует аккуратности. При малом x_k по завершении описанного выше алгоритма решение $y(x)$ для найденного значения y_0 будет пересекать ось x вблизи точки $x = x_k$ под заметным углом, что не дает гарантии хорошего приближения к $y_n(x)$. При слишком большом x_k решение "срывается" с оси x из-за всегда имеющихся ошибок округления и неустойчивого характера искомых решений. Практически оказалось достаточным взять $x_k = 5$ при поиске $y_0(x)$ и $x_k = 10$ при поиске следующих трех мод.

п. 5. Сводка результатов

Для решений краевой задачи (П2)-(П3) справедливы следующие легко проверяемые соотношения (теорема вириала):

$$A_1 : A_2 : A_3 = 3 : 4 : 1 \quad (\text{П11})$$

Здесь:

$$A_1 = \int y^2 x^2 dx \quad A_2 = \int y^4 x^2 dx \quad A_3 = \int y^2 x^2 dx .$$

Точные соотношения (П1.1) могут служить для оценки найденных численно решений. Оказалось, что они выполняются с высокой точностью: с тремя-четырьмя значащими цифрами, с той точностью, с которой значение параметра γ_0 . В таблице для нескольких первых решений $y_n(x)$ приводятся результаты вычисления величин γ_0 и $\Gamma \equiv A_3$.

Результаты вычислений

n	γ_0	Γ	n	γ_0	Γ
0	4,338	1,507	2	29,13	28,70
1	14,10	9,477	3	49,36	63,94

ЛИТЕРАТУРА

1. Балабаев Н.К., Лахно В.Д. О структуре полярона сильной связи. Препринт ИЦБИ АН СССР, Пушкино, 1979, 23 с.; Теор. и матем. физика, 1980, т. 45, № 1, с. 139.
2. Дейген М.Ф., Пекар С.И. Журн. эксп. и теор. физики, 1951, т. 21, с. 803.
3. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М., Наука, 1967.
4. Боголюбов Н.Н. – Укр. матем. журнал, 1950, т. 2, с. 3.
5. Уизем Дж. Нелинейные волны. М., Мир, 1977.
6. Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Паствур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., Наука, 1982.
7. Нелинейная квантовая теория поля. М., ИЛ, 1959.
8. Whitfield G., Shaw P.B. – Phys. Rev. B, 1980, v. 21, N10, p. 4349.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
§ 1. Полуклассическое описание электрона в гомеополярном кристалле	3
§ 2. Квантовое описание электрона в гомеополярном кристалле	6
§ 3. Свойства самосогласованных состояний	7
§ 4. Сравнение с полярными самосогласованными состояниями	9
Дополнение. Решение краевой задачи	10
Литература	15

Николай Кириллович Балабаев, Виктор Дмитриевич Лахно,
Альберт Макарьевич Молчанов

ВОЗБУЖДЕННЫЕ САМОСОГЛАСОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ
ЭЛЕКТРОНОВ В ГОМЕОПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ
Препринт

Отредактировано и подготовлено к печати в ОНТИ НЦБИ АН СССР

Редактор Т.В.Букина

Технический редактор С.М.Ткачук

Корректоры Т.К.Крейцер, Л.М.Орлова

Подписано в печать 30.11.83 г. Т-23319. Уч.-изд.л. 0,9.

Формат 60x90/16. Тираж 150 экз. Бумага офсетная.

Заказ 3960Р. Бесплатно. Изд. № 444.

Отпечатано на ротапринте в Отделе научно-технической
информации Научного центра биологических
исследований АН СССР в Пущине

