ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СРЕДЕ В КВАЗИИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Казанский Н.Л., Хонина С.Н., Харитонов С.И.
Институт систем обработки изображений РАН,
Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва
(национальный исследовательский университет)

Аннотация

В статье проанализированы некоторые известные результаты о движении осциллятора Блоха в кристалле в импульсном представлении. Показано, что описание движения электрона в изложении ряда авторов является неполным. На самом деле, точное описание поведения электрона в кристаллической решётке возможно только на основе решения уравнения Шрёдингера в импульсном представлении. В работе получены приближённые решения уравнения Шрёдингера для электрона в периодическом потенциале кристаллической решётки и уравнения для эволюции средних значений оператора импульса и координаты. Для описания поведения электрона в кристаллической решётке при наличии однородного электрического поля и возмущения, вызванного внешней электромагнитной волной, использована теория возмущений. Представленные методы в дальнейшем можно использовать для расчёта оптических устройств, в том числе оптических транзисторов.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, импульсное представление, кристаллическая решётка, квазиимпульс.

Введение

Для расчёта оптических устройств, в том числе оптических транзисторов, требуется решить задачу о движении электрона в периодическом поле кристалла или квантовой сверхрешётки [1].

Движение электронов в периодических кристаллах под влиянием внешнего электрического поля было предметом большого интереса как в первые годы создания квантовой механики [2, 3, 16, 24], так и в последнее время [14, 17]. В настоящем актуальным является решение двух важных и тесно связанных между собой проблем.

Одна из проблем касается нахождения спектра собственных значений гамильтониана при наличии электрического поля

$$H_f = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\left(x\right) - Fx, \qquad (1)$$

где m – масса электрона, $F = eE$, E – электрическое поле в направлении x, e – заряд электрона, $V(x)$ – периодический кристаллический потенциал с периодом d.

Вследствие периодичности кристаллического потенциала собственные значения гамильтониана при наличии электрического поля смещаются. Эти смещения можно представить в виде регулярной лестницы (обычно называемой лестницей Ванье – Штарка).

Ванье [22] в шестидесятые годы предсказал существование этой лестницы в рамках теории возмущений. Сама природа этих лестниц была предметом больших дискуссий Ванье с другими авторами ([20] и ссылки в ней). Это продолжалось до тех пор, пока в работе [2] не было приведено доказательство, что, по крайней мере, для регулярного периодического потенциала гамильтониан H не имеет дискретных собственных значений. Однако в этом случае существуют резонансы. Отличие резонансных состояний от стационарных состоит в том, что волновые функции, соответствующие стационарным состояниям, остаются неизменными, а функции, соответствующие резонансам, медленно изменяются во времени. Волновую функцию, соответствующую резонансам, можно считать неизменной (с точностью до фазового множителя) в течение времени, которое называется «временем жизни резонанса». «Время жизни» определяется мнимой частью энергетического спектра. Только в последние годы существование таких резонансов было строго доказано [9] и вычислена их мнимая часть [11] (см. также обзор работы [8]).

Другая проблема касается поведения во времени наблюдаемого центра тяжести волнового пакета. На самом деле, в силу периодичности кристаллического потенциала, мы будем наблюдать периодическое движение (Bloch Oscillator) волнового пакета с периодом, который определяется внешним однородным электрическим полем. Это приводит при некоторых обстоятельствах к существованию отрицательной дифференциальной проводимости [7]. Наивное теоретическое обоснование этих фактов на основе «теоремы ускорения» во многих случаях недостаточно для понимания природы поведения электрона в кристаллической решётке.

Первоначально блоховские осцилляции были объяснены в приближении, в котором не учитывается взаимодействие между различными энергетическими зонами и электрон движется в пределах одной энергетической зоны. Однако это приближение для «теоремы ускорения» оказывается недостаточным для решения многих задач.

Для того, чтобы получить более реалистичную модель осцилляторов Блоха и отрицательной дифференциальной проводимости, недавно была предложена кинетическая теория (см. [15], [21]). В рамках этой теории предполагается, что значения энергий изначально удовлетворяют статистике Больцмана – Максвелла. Поведение осцилляторов Блоха хорошо изучено [4, 19]. Подчеркнём также, что в последнее время анализ осцилляторов Блоха, энергия которых не полностью локализована вблизи края энергетической зоны, представляет интерес в теории ультрахолодных атомов в периодических потенциалах [6].

Целью данной публикации является систематическое изложение материала, служащего основой для описания поведения электрона в кристаллической решётке. Это изложение проведём в три этапа. Во-первых, рассмотрим «теорему ускорения», которая является краеугольным камнем в теории электронного транспорта в кристаллах. Здесь мы будем придерживаться изложения работы [5].

Во-вторых, кратко осветим результаты, полученные в работах [10, 11, 12, 13] (в этих работах описаны математический аппарат и полная версия «теоремы ускорения»), и приведём выражения для тяжести и дисперсии волнового пакета в координатном представлении. В результате получим теоретическое объяснение «дыхания» осцилляторов Блоха. Эти результаты, к сожалению, не изложены в учебниках по теории твёрдого тела, которые изданы на русском языке. Мы хотим восполнить этот пробел.

В-третьих, рассмотрим применение теории возмущений для уравнения Шрёдингера в кристалле при наличии постоянного электрического поля и возмущения, которое вызвано наличием внешнего переменного электромагнитного поля. Это в дальнейшем позволит изучать дифракцию электромагнитных волн в квантовых сверхрешётках.

1. Общие положения

Рассмотрим временное уравнение Шрёдингера

$$ih\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=H_f\Psi(x,t)\,. \tag{2}$$

Сделаем замену переменных $\tau=Ft/h$.

Временное уравнение Шрёдингера в этих переменных имеет вид:

$$iF\frac{\partial\Psi\left(x,\tau\right)}{\partial\tau}=H_f\Psi\left(x,\tau\right). \tag{3}$$

Представим решение уравнения Шрёдингера в виде разложения:

$$\Psi\left(x,\tau\right)=\sum_n\int\varphi_n\left(k,\tau\right)\phi_n\left(k,x\right)\mathrm{d}k\,, \tag{4}$$

$$\varphi_n\left(k,\tau\right)=\int\Psi\left(x,\tau\right)\phi_n^*\left(k,x\right)\mathrm{d}x\,, \tag{5}$$

$\phi_n\left(k,x\right)=\exp\left(ikx\right)u_n\left(k,x\right)$ – блоховская функция, удовлетворяющая уравнению Шрёдингера (3) на собственные значения в отсутствие электрического поля:

$$H_0\phi_n\left(k,x\right)=E_n\left(k\right)\phi_n\left(k,x\right), \tag{6}$$

$$H_0=-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\left(x\right). \tag{7}$$

Учитывая изложенное в Приложении А и подставляя разложение (4) в уравнение Шрёдингера (3), получаем приведённое уравнение Шрёдингера в квазиимпульсном представлении:

$$\begin{gathered}\left[E_n\left(k\right)-iF\frac{\partial}{\partial k}-iF\frac{\partial}{\partial\tau}\right]\varphi_n\left(k,\tau\right)-\\-\sum_l X_{n,l}\left(k\right)\varphi_l\left(k,\tau\right)=0,\end{gathered} \tag{8}$$

$$X_{n,l}\left(k\right)=\int_{-\infty}^{\infty}u_n^*\left(k,x\right)\frac{\partial u_l\left(k,x\right)}{\partial k}\mathrm{d}x\,. \tag{9}$$

Умножим полученное уравнение (8) на $\varphi_n^*\left(k,\tau\right)$

$$\begin{gathered}-iF\varphi_n^*\left(k,\tau\right)\frac{\partial}{\partial k}\varphi_n\left(k,\tau\right)-\\-\left[E_n\left(k\right)-iF\frac{\partial}{\partial\tau}\right]\left\|\varphi_n\left(k,\tau\right)\right\|^2-\\-\sum_l\varphi_n^*\left(k,\tau\right)X_{n,l}(\varphi_l\left(k,\tau\right)=0.\end{gathered} \tag{10}$$

Далее просуммируем по n и от полученного уравнения возьмём мнимую часть. В результате получим, что

$$\left[F\frac{\partial}{\partial\tau}+F\frac{\partial}{\partial k}\right]\Phi\left(k,\tau\right)=0\,, \tag{11}$$

где

$$\Phi\left(k,\tau\right)=\sum_n\left\|\varphi_n\left(k,\tau\right)\right\|^2. \tag{12}$$

Решением этого уравнения является произвольная функция $\Phi\left(k,\tau\right)=U\left(k-\tau\right)$, такая, что

$$\int_B U\left(k-\tau\right)\mathrm{d}k=\sum_n\int_B\left\|\varphi_n\left(k,\tau\right)\right\|^2\mathrm{d}k=1\,. \tag{13}$$

Вычислим теперь среднее значение квазиимпульса, которое определим следующим образом:

$$\left\langle k\left(\tau\right)\right\rangle=\sum_n\int_B k\left\|\varphi_n\left(k,\tau\right)\right\|^2\mathrm{d}k\,. \tag{14}$$

Найдём эволюцию среднего значения квазиимпульса во времени

$$\begin{aligned}\left\langle k\left(\tau\right)\right\rangle&=\sum_n\int_B k\left\|\varphi_n\left(k,\tau\right)\right\|^2\mathrm{d}k=\\&=\int_B kU\left(k-\tau\right)\mathrm{d}k=\\&=\int_B\left(\xi+\tau\right)U\left(\xi\right)\mathrm{d}\xi=\\&=\int_B\xi U\left(\xi\right)\mathrm{d}\xi+\tau\int_B U\left(\xi\right)\mathrm{d}\xi.\end{aligned} \tag{15}$$

Далее, используя условие нормировки (13), получаем

$$\left\langle k\left(\tau\right)\right\rangle=\left\langle k\left(0\right)\right\rangle+\tau\,. \tag{16}$$

Уравнение (16) часто называют «теоремой ускорения». Подчеркнём, что мы не делаем никаких предположений о форме начального волнового пакета, кроме предположения о нормализации. В комментарии к этой теореме Callaway ([5], С. 468) отметил, что «мы часто находим в литературе альтернативную формулировку теоремы, которая должна быть понята только с позиции введения “центра тяжести пакета”». На самом деле большинство авторов учебников по теории твёрдого тела приписывают этой теореме иную интерпретацию (см., например, [18], С. 191) .

Отметим, что туннельный эффект между зонами не рассматривается в этой интерпретации. На самом деле, этот эффект не важен, так как время туннелирования между энергетическими зонами, как правило, гораздо больше, чем период осцилляций Блоха. Намного большее значение имеет тот факт, что эта интерпретация касается только чисто блоховских состояний, в то время как локализованный волновой пакет состоит из суперпозиции блоховских функций. Для того, чтобы устранить этот недостаток, мы сформулируем результат в более общей форме.

2. Уравнение движения в отсутствие взаимодействия между зонами

В случае, когда взаимодействие между зонами отсутствует, уравнение Шрёдингера в квазиимпульсном представлении имеет вид

$$\left[E_n(k)-iF\frac{\partial}{\partial k}-iF\frac{\partial}{\partial\tau}-X_{n,n}(k)\right]\varphi_n(k,\tau)=0\,. \quad (17)$$

Легко показать (см. Приложение Б), что это уравнение имеет решение

$$\varphi_n(k,\tau)=\exp\left(i\theta_n(k,\tau)\right)\varphi_n(k-\tau,0)\,, \quad (18)$$

$$\theta_n(k,\tau)=-\frac{1}{F}\int_{k-\tau}^{k}\left[E_n(q)-FX_{n,n}(q)\right]\mathrm{d}q\,. \quad (19)$$

3. Эволюция средних значений оператора координаты

Используя результаты, полученные в предыдущем пункте, получаем, что решение уравнения Шрёдингера в случае, когда отсутствует взаимодействие между различными зонами, можно записать в виде

$$\begin{aligned}&\Psi(x,\tau)=\\&=\sum_n\int_B\exp\left(i\theta_n(k,\tau)\right)\varphi_n(k-\tau,0)\phi_n(k,x)\mathrm{d}k.\end{aligned} \quad (20)$$

На основании полученного решения найдём закон эволюции среднего значения оператора координаты. Среднее значение оператора координаты находится по формуле:

$$X(\tau)=\left\langle\Psi(x,\tau)x\Psi(x,\tau)\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x\left\|\Psi(x,\tau)\right\|^2\mathrm{d}x\,. \quad (21)$$

Среднее значение дисперсии равно

$$S(\tau)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(x-X(\tau)\right)^2\left\|\Psi(x,\tau)\right\|^2\mathrm{d}x\,. \quad (22)$$

В работе [17] показано, что

$$\begin{aligned}&X(\tau)-X(0)=\\&=\sum_n\frac{1}{F}\int_B\left\|\varphi_n(k,0)\right\|^2\left[E_n(k+\tau)-E_n(k)\right]dk,\end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned}&S(\tau)-S(0)=-\left[X^2(\tau)-X^2(0)\right]+\\&+\frac{1}{F}\int_B\sum_n\left\|\varphi_n(k,0)\right\|^2\left[E_n(k+\tau)-E_n(k)\right]^2\mathrm{d}k\,.\end{aligned} \quad (24)$$

Соотношение можно переписать в виде

$$F\left(X(\tau)-X(0)\right)=\left\langle E_n(k+\tau,0)-E_n(k,0)\right\rangle. \quad (25)$$

Полученное выражение можно записать в дифференциальной форме

$$F\frac{\mathrm{d}X(\tau)}{\mathrm{d}\tau}=\left\langle\frac{\partial E_n(k+\tau,0)}{\partial k}\right\rangle, \quad (26)$$

$$F\frac{\mathrm{d}^2X(\tau)}{\mathrm{d}\tau^2}=\left\langle\frac{\partial^2E_n(k+\tau,0)}{\partial k^2}\right\rangle. \quad (27)$$

4. Теория возмущений

Запишем уравнение Шрёдингера в квазиимпульсном представлении (см. Приложение В)

$$\begin{aligned}&i\frac{\partial}{\partial\tau}\varphi_n(k,\tau)+i\frac{\partial}{\partial k}\varphi_n(k,\tau)=\\&=\left(E_n(k)\varphi_n(k,\tau)-\sum_l X_{n,l}(k,\tau)\varphi_l(k,\tau)\right)F^{-1}.\end{aligned} \quad (28)$$

В операторном виде это уравнение можно переписать следующим образом

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\varphi(k,\tau)=\\&=-iF^{-1}\left(E(k)-X(k,\tau)\right)\varphi(k,\tau),\end{aligned} \quad (29)$$

где $\varphi(k,\tau)$ – вектор-столбец, $E(k)$ – диагональная матрица, X – эрмитова матрица.

Обозначим через $D(k)$ матрицу, элементы которой совпадают с диагональными элементами матрицы $X(k)$, а $\gamma(k,\tau)$ – решение невозмущённого уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\gamma(k,\tau)=-iF^{-1}\left(E(k)-D(k)\right)\gamma(k,\tau)\,,$$

$D(k)$ – диагональная матрица.

Возмущённое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\varphi(k,\tau)=\\&=-iF^{-1}\left(E(k)-D(k)-\delta X(k,\tau)\right)\varphi(k,\tau).\end{aligned} \quad (30)$$

Представим решение в виде

$$\varphi(k,\tau)=\gamma(k,\tau)+\delta(k,\tau)\,, \quad (31)$$

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\left(\gamma(k,\tau)+\delta(k,\tau)\right)=\\&=-iF^{-1}\left(\left(E(k)-D(k)\right)-\delta X(k,\tau)\right)\times\\&\times\left(\gamma(k,\tau)+\delta(k,\tau)\right),\end{aligned} \quad (32)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\delta(k,\tau)=$$
$$=-iF^{-1}\Big(\big(E(k)-D(k)\big)\delta(k,\tau)-f(k,\tau)\Big),$$

где $f(k,\tau)=\delta X(k,\tau)\gamma(k,\tau)$.

Выражение (32) представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных. Отметим, что она распадается на независимые квазилинейные дифференциальные уравнения первого порядка. Полученные квазилинейные уравнения первого порядка в частных производных можно решить известными методами (см. приложение Б). Таким образом, можно вычислить значения функции $\delta(k,\tau)$, что позволяет на основе (31) уточнить известные решения.

Заключение

В работе дана строгая формулировка «теоремы ускорения». Приведены выражения для эволюции во времени средних значений оператора координаты и квазиимпульса. Разработан метод, позволяющий изучать движение электрона в кристаллической решётке. В наших будущих работах этот метод будет использован для описания взаимодействия полупроводниковой квантовой сверхрешётки с внешним электромагнитным полем. Это позволит объяснить нелинейные свойства метаматериалов на основе квантовых сверхрешёток, которые в дальнейшем предполагается использовать при создании оптических транзисторов.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № НШ-4128.2012.9, грантов РФФИ №№ 11-07-12036, 11-07-00153, 10-07-00109, 11-07-13164, государственных контрактов с Министерством образования и науки РФ №№ 07.514.11.4055, 07.514.11.4060, 14.740.11.0016, 02.740.11.0805, 02.740.11.0841.

Приложение А

Рассмотрим интеграл

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}\exp(q-k)u_n^*(k,x)xu_l(q,x)\,\mathrm{d}x=\\&=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial q}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(q-k)u_n^*(k,x)u_l(q,x)\,\mathrm{d}x-\\&-\int_{-\infty}^{\infty}\exp(q-k)u_n^*(k,x)\frac{\partial}{\partial q}u_l(q,x)\,\mathrm{d}x.\end{aligned}\qquad(1А)$$

В результате преобразований получаем

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}\exp(q-k)u_n^*(k,x)xu_l(q,x)\,\mathrm{d}x=\\&=i\frac{\partial}{\partial k}\delta(k-q)-X_{nl}\delta(k-q),\end{aligned}\qquad(2А)$$

где

$$X_{nl}=\int_E u_n^*(k,x)\frac{\partial}{\partial q}u_l(q,x)\,\mathrm{d}x\,.\qquad(3А)$$

В последнем выражении интегрирование ведётся по объёму одной элементарной ячейки.

Приложение Б

Рассмотрим решение уравнения

$$\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\right)\delta(k,\tau)=c(k)\delta(k,\tau)+d(k,\tau),\qquad(1Б)$$

$$c(k)=-iF^{-1}\big(E(k)-Y(k)\big)\delta(k,\tau),\qquad(2Б)$$

$$d(k,\tau)=iF^{-1}\delta X(k,\tau)\gamma(k,\tau),\qquad(3Б)$$

$$\tau=0,\ k=t,\ \delta=U(t).\qquad(3’Б)$$

Решение характеристической системы [25] имеет вид

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}s}=1,\\ \dfrac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}s}=1,\\ \dfrac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}s}=c(k)\delta+d(k,\tau).\end{cases}\qquad(4Б)$$

Подставляя решения первых двух уравнений системы (4Б) в последнее, получаем

$$\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}s}=c(k_0+s)\delta+d(k_0+s,\tau_0+s),\qquad(5Б)$$

k_0,τ_0 – произвольные константы.

Решение уравнения (5Б) имеет вид

$$\delta(s)=A(s)\exp\left(\int_0^s c(k_0+y)\,\mathrm{d}y\right),\qquad(6Б)$$

$A(s)$ – функция, подлежащая определению.

Подставляя представление для $\delta(s)$ в уравнение (5Б), получаем дифференциальное уравнение относительно функции $A(s)$:

$$\frac{\mathrm{d}A(s)}{\mathrm{d}s}=d(k_0+s,\tau_0+s)\exp\left(-\int_0^s c(k_0+y)\,\mathrm{d}y\right).\qquad(7Б)$$

Решая это уравнение, получаем

$$\begin{aligned}&A(s)=\delta_0+\\&+\int_0^s d(k_0+z,\tau_0+z)\exp\left(-\int_0^z c(k_0+y)\,\mathrm{d}y\right),\end{aligned}\qquad(8Б)$$

где δ_0 – произвольная константа.

В результате решение характеристического уравнения можно записать в виде

$$\begin{aligned}&\delta(s)=\Big(\delta_0+\int_0^s\Big[d(k_0+z,\tau_0+z)\times\\&\times\exp\left(-\int_0^z c(k_0+y)\,\mathrm{d}y\right)\Big]\mathrm{d}z\Big)\times\\&\times\exp\left(\int_0^s c(k_0+y)\,\mathrm{d}y\right).\end{aligned}\qquad(9Б)$$

Тогда решение характеристической системы с начальными условиями (3’Б) имеет вид

$$\begin{aligned}&\delta(s,t)=\Big(U(t)+\\&+\int_0^s\Big[d(t+z,z)\exp\Big(-\int_0^z c(t+y)\,\mathrm{d}y\Big)\Big]\mathrm{d}z\Big)\times\\&\times\exp\Big(\int_0^s c(t+y)\,\mathrm{d}y\Big).\end{aligned}\tag{10Б}$$

Выражая теперь переменные s,t через k,τ и используя начальные условия, получаем решение исходного уравнения (1Б) в частных производных в виде

$$\begin{aligned}&\delta(k,\tau)=\Big(U(k-\tau)+\int_0^s\Big[d(k-\tau+z,z)\times\\&\times\exp\Big(-\int_0^z c(k-\tau+y)\,\mathrm{d}y\Big)\Big]\mathrm{d}z\Big)\times\\&\times\exp\Big(\int_0^s c(k-\tau+y)\,\mathrm{d}y\Big).\end{aligned}\tag{11Б}$$

Приложение В

Получим уравнение Шрёдингера в квазиимпульсном представлении при наличии возмущения. В координатном представлении гамильтониан уравнения имеет вид

$$H_f=H_0-Fx+V_1(x,\tau),\tag{1В}$$

$$H_0=-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V_0(x),\tag{2В}$$

где $V_0(x)$ – периодический потенциал кристаллической решётки, $V_1(x,\tau)$ – возмущение, вызванное внешним полем. Тогда представим решение уравнения Шрёдингера в виде

$$\Psi(x,\tau)=\sum_n\int f_n(k,\tau)\phi_n(k,x)\,\mathrm{d}k,\tag{3В}$$

$$\begin{aligned}&iF\sum_n\int\frac{\partial f_n(k,\tau)}{\partial\tau}\phi_n(k,x)\,\mathrm{d}k=\\&=\sum_n\int f_n(k,\tau)H_0\phi_n(k,x)\,\mathrm{d}k-\\&-F\sum_n\int f_n(k,\tau)x\phi_n(k,x)\,\mathrm{d}k+\\&+V_1(x,\tau)\sum_n\int f_n(k,\tau)\phi_n(k,x)\,\mathrm{d}k.\end{aligned}\tag{4В}$$

Умножим (4В) скалярно на $\phi_m(k,x)$

$$\begin{aligned}&iF\sum_n\int\frac{\partial f_n(k,\tau)}{\partial\tau}\big\langle\phi_m(k,x)\phi_n(k,x)\big\rangle\,\mathrm{d}k=\\&=\sum_n\int f_n(k,\tau)E_n(k)\big\langle\phi_m(k,x)\phi_n(k,x)\big\rangle\,\mathrm{d}k-\\&-F\sum_n\int f_n(k,\tau)\big\langle\phi_m(k,x)x\phi_n(k,x)\big\rangle\,\mathrm{d}k+\\&+\sum_n\int f_n(k,\tau)\big\langle\phi_m(k,x)V_1(x,\tau)\phi_n(k,x)\big\rangle\,\mathrm{d}k,\end{aligned}\tag{5В}$$

$$\begin{aligned}&\Big[E_n(k)-iF\frac{\partial}{\partial k}-iF\frac{\partial}{\partial\tau}\Big]f_n(k,\tau)-\\&-\sum_m X_{nm}(k)f_m(k,\tau)-\\&-\sum_n\int\big(V_1(k,\tau)\big)_{mn}f_n(k,\tau)\,\mathrm{d}k=0.\end{aligned}\tag{6В}$$

К сожалению, полученное уравнение (6В) является интегро-дифференциальным, а значит, получить его решение в аналитическом виде нельзя. Однако мы можем записать соответствующее ему приближённое дифференциальное уравнение. Для этого заменим функцию $f_n(k,\tau)$ на $\varphi_n(k,\tau)$, которая является решением уравнения в отсутствие возмущения.

В этом случае интегро-дифференциальное уравнение превращается в квазилинейное дифференциальное уравнение в частных производных:

$$\begin{aligned}&\Big(\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\partial}{\partial k}\Big)\varphi(k,\tau)=\\&=-iF^{-1}\big(E(k)-X(k,\tau)\big)\varphi(k,\tau),\end{aligned}\tag{7В}$$

которое можно решить известными (Приложение Б) методами (здесь $\varphi(k,\tau)$ – вектор-столбец $\varphi_n(k,\tau)$).

Литература (References)

1. **Altarelli, M.** Envelope function approach to electronic states in heterostructures, in interfaces, quantum well and superlattice / ed. by R. Leavens and R. Taylor. – London: Plenum, 1988. – P. 43.
2. **Bentosela, F.** Schrodinger operators with an electric field and random or deterministic potentials / F. Bentosela, R. Carmona, P. Duclos, B. Simon, B. Souillard and R. Weder // Communications in Mathematical Physics. – 1983. – Vol. 88. – P. 387-397.
3. **Bloch, F.** Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern / F. Bloch // Z. Phys. – 1928. – Vol. 52. – P. 555-600.
4. **Bouchard, A.M.** Bloch oscillations and other dynamical phenomena of electrons in semiconductor superlattices / A.M. Bouchard and M. Luban // Phys. Rev. – 1995, August 15. – Vol. 52, Issue 7. – P. 5105-5123.
5. **Callaway, J.** Quantum theory of the solid state / J. Callaway. – New-York: Academic Press, 1974. – 385 p.
6. **Carusotto, I.** Sensitive measurement of forces at micron scale using Bloch oscillations of ultracold atoms / I. Carusotto, L. Pitaevskii, S. Stringari, G. Modugno, M. Inguscio // Physical Review Letters. – 2005. – Vol. 95, Issue 9. – P. 093202.
7. **Esaki, L.** Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors / L. Esaki and R. Tsu // IBM Journal of Research and Development. – 1970. – Vol. 14. – P. 61-65.
8. **Gluck, M.** Wannier-Stark resonances in optical and semiconductor superlattices / M. Gluck, A.R. Kolovsky and H.J. Korsch // Physics Reports. – 2001. – Vol. 366, Issue 3. – 94 p.
9. **Grecchi, V.** Stark ladder of resonances: Wannier ladders and perturbation theory / V. Grecchi, M. Maioli and A. Sacchetti // Communications in Mathematical Physics. – 1994. – Vol. 159. – P. 605.
10. **Grecchi, V.** Metastable Bloch Oscillators / V. Grecchi and A. Sacchetti // Phys. Rev. Lett. – 1997. – Vol. 78. – P. 4474.
11. **Grecchi, V.** Lifetime of the Wannier-Stark resonances and perturbationtheory / V. Grecchi and A. Sacchetti // Com-

munications in Mathematical Physics. – 1997. – Vol. 185, Issue 2. – P. 359-378.
12. **Grecchi, V.** Wannier-Bloch Oscillators / V. Grecchi and A. Sacchetti // Communications in Mathematical Physics. – 1998. – Vol. 197, Issue 3. – P. 553-569.
13. **Grecchi, V.** Acceleration theorem for Bloch oscillators / V. Grecchi and A. Sacchetti // Phys. Rev. B. – 2001. Vol. 63, Issue 21. – P. 1-4.
14. **Hartmann, T.** Dynamics of Block oscillations / T. Hartmann, F. Keck, H.J. Korsch and S. Mossmann // New Journal of Physics. – 2004. – Vol. 6. – P. 2-25.
15. **Holthaus, M.** Bloch oscillations and Zener breakdown in an optical lattice / M. Holthaus // J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. – 2000. – Vol. 2, Issue 5. – P. 589-604.
16. **Houston, H.V.** Acceleration of electrons in a crystal lattice / H.V. Houston // Phys. Rev. – 1940. – Vol. 57. – P. 184-186.
17. **Hövermann, F.** Semiclassical limit for the Schrödinger equation with a short scale periodic potential / F. Hövermann, H. Spohn and S. Teufel // Communications in Mathematical Physics. – 2001. – Vol. 215, Issue 3. – P. 609-629.
18. **Kittel, C.** Quantum theory of solids. 2nd edition / C. Kittel. – New-York: John Wiley, 1987.
19. **Lyssenko, V.G.** Direct measurement of the spatial displacement of Bloch-oscillating electrons in semiconductor superlattices / V.G. Lyssenko, G. Valušis, F. Löser, T. Hasche, K. Leo, M.M. Dignam and K. Köhler // Phys. Rev. Lett. – 1997. – Vol. 79. – P. 301-304.
20. **Nenciu, G.** Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. Rigorous justification of the effective Hamiltonians / G. Nenciu // Reviews of Modern Physics. – 1991. – Vol. 63(1). – P. 91-127.
21. **Wacker, A.** Semiconductor superlattices: A model system for nonlinear transport / A. Wacker // Physics Reports. – 2002. – Vol. 357. – P. 1-111.
22. **Wannier, G.H.** Wave functions and effective Hamiltonian for Bloch electrons in an electric field / G.H. Wannier // Phys. Rev. – 1960. – Vol. 117(2). – P. 432-439.
23. **Wannier, G.H.** Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields / G.H. Wannier // Reviews of Modern Physics. – 1962. – Vol. 34(4). – P. 645-655.
24. **Zener, C.** A theory of electrical breakdown of solid dielectrics / C. Zener // Proc. Roy. Soc. (London). – 1934. – Vol. A145. – P. 523-529.
25. **Кошляков, Н.С.** Уравнения в частных производных математической физики / Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов – М.: Высшая школа, 1970. – 712 с. (Koshlyakov, N. S. Partial differential equations of mathematical physics // N. S. Koshlyakov, E. B. Gliner, M. M. Smirnov – Moscow: High School, 1970. – 712 p.)

THE PERTURBATION THEORY FOR SCHRODINGER EQUATION IN THE PERIODIC ENVIRONMENT IN MOMENTUM REPRESENTATION

N.L. Kazanskiy, S.N. Khonina, S.I. Kharitonov
Image Processing Systems Institute RAS,
S.P. Korolyov Samara State Aerospace University

Abstract

In article some known results about Bloch Oscillations movement in a crystal in pulse representation are considered. We emphasize that the electron movement description is incomplete in a some authors statement. Actually, the exact description of electron behaviour in a crystal lattice is possible only on the basis of Schrödinger equation decision in pulse representation. The approached decisions of Schrödinger equation for electron behaviour in periodic potential of a crystal lattice and the equation for evolution of average values of the impulse and coordinate operator are received. For the electron behaviour description in a crystal lattice presence of homogeneous electric field and the indignation caused by an external electromagnetic wave the theory of indignations is used. The presented methods can be used further for calculation of optical devices including optical transistors.

Key words: Schrödinger equation, pulse representation, a crystal lattice, momentum representation.

Сведения об авторах

*Сведения об авторах **Казанский Николай Львович** и **Харитонов Сергей Иванович** – см. стр. 13 этого номера.*

Хонина Светлана Николаевна, доктор физико-математических наук, профессор Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королёва; ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт систем обработки изображений РАН. Область научных интересов: дифракционная оптика, сингулярная оптика, модовые и поляризационные преобразования, оптическое манипулирование, оптическая и цифровая обработка изображений.

E-mail: khonina@smr.ru .

Svetlana Nikolaevna Khonina, Doctor of Physical and Mathematical Sciences; Professor of the Samara State Aerospace University named after S.P. Korolyov. Leading researcher of the Image Processing Systems Institute of the RAS. Research interests: diffractive optics, singular optics, mode and polarization transformations, optical manipulating, optical and digital image processing.

Поступила в редакцию 20 февраля 2012 г.