

Волноводные свойства двух параллельных дефектов в условиях двухканального рассеяния

А. М. Косевич¹, Д. В. Мацокин²

¹ Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
Украина, 61164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua

² Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина, Украина, 61077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Статья поступила в редакцию 29 ноября 1999 г., после переработки 22 декабря 1999 г.

Показано, что пара параллельных плоских дефектов в кристалле может играть роль волновода для квантовой частицы или волны, имеющей две ветви закона дисперсии. Определены энергии (или частоты), при которых возбуждения локализованы между дефектами и свободно распространяются вдоль них. В двумерной системе существует дискретный набор энергий, при которых между двумя параллельными линейными дефектами могут быть «зажаты» $2D$ возбуждения.

Показано, що пара паралельних плоских дефектів в кристалі може виступати в ролі хвильовода для квантової частинки або хвилі, яка має дві гілки закону дисперсії. Визначено енергії (або частоти), з якими збудження локалізовані між дефектами та вільно розповсюджуються вздовж них. В двовимірній системі існує дискретний набір енергій, при яких між двома паралельними лінійними дефектами можуть бути «затиснуті» $2D$ збудження.

PACS: 03.65.Ge, 03.65.Nk

В последнее время возрос интерес к эффектам, обусловленным взаимодействием свободно распространяющихся и локализованных на дефектах состояний одной и той же частицы или волны. Природа этих эффектов тесно связана со свойствами квазилокальных состояний сплошного спектра [1]. Проще всего интересующие нас эффекты проявляются при изучении движения частицы вдоль канала, приводящего к размерному квантованию ее поперечной энергии. Наличие точечного дефекта в такой системе приводит к взаимодействию состояний дискретного и сплошного спектров, которое порождает ряд резонансных явлений. В [2,3] было обращено внимание на резонансные особенности коэффициента прохождения электронов через $2D$ канал, содержащий притягивающую примесь. В [4,5] экспериментально обнаружены резонансы проводимости, связанные с взаимодействием на примеси частиц, отвечающих различным ветвям спектра. В работах [6,7] проведен подробный анализ взаимодействия с локальными дефектами волн, имеющих несколько ветвей закона дисперсии, и показано, что при определенном соотношении параметров

системы возможно как полное отражение, так и полное прохождение волны через такой дефект. В работе [7] было обращено внимание на то, что в $2D$ квантовом канале возможно «запирание» волны между двумя точечными примесями при «критических» значениях энергии волны и расстояния между этими примесями.

В настоящей работе обсуждаются волноводные свойства двух плоских параллельных дефектов в кристалле по отношению к волне, имеющей закон дисперсии с двумя ветвями.

Рассматривается система, в которой квантовая частица имеет закон дисперсии с двумя ветвями:

$$\varepsilon = \frac{1}{2m_1} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{1}{2m_2} (k_y^2 + k_z^2) + \frac{1}{2m_3} (k_x - k_0)^2. \quad (2)$$

В случае электрона ε и m — его энергия и эффективная масса, а в случае фонона ε — это квадрат частоты, а $1/m$ — квадрат фазовой скорости (принято $\hbar = 1$). На рис. 1 в произвольном

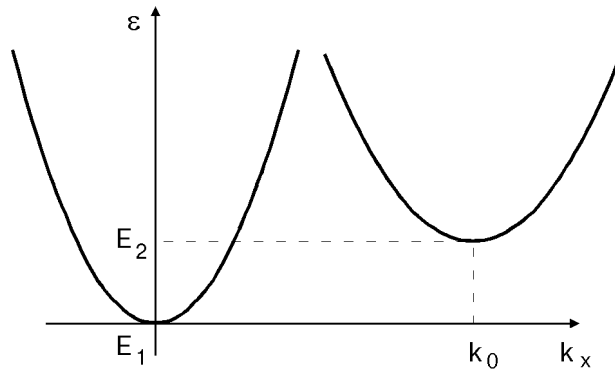


Рис. 1. Две ветви закона дисперсии частицы при фиксированных k_y, k_z . $E_1 = (k_y^2 + k_z^2)/2m_1$, $E_2 = \varepsilon_0 + (k_y^2 + k_z^2)/2m_2$.

масштабе показан график закона дисперсии при $k_y = \text{const}$ и $k_z = \text{const}$.

В идеальной системе волновые функции ψ_1 и ψ_2 , отвечающие этим ветвям закона дисперсии, являются независимыми состояниями. При наличии в системе неких дефектов уравнения для волновых функций могут быть записаны в виде

$$\frac{1}{2m_1} \Delta \psi_1 + \varepsilon \psi_1 - U_1 \{\psi_1, \psi_2\} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{1}{2m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2m_3} \left(\frac{\partial}{\partial x} - ik_0 \right)^2 \psi_2 + (\varepsilon - \varepsilon_0) \psi_2 - U_2 \{\psi_1, \psi_2\} = 0, \quad (4)$$

где U_1, U_2 — слагаемые, описывающие «двухканальное» взаимодействие волн на дефекте.

$$\begin{cases} \psi_s \left(x, y, \pm \frac{h}{2} + 0 \right) = \psi_s \left(x, y, \pm \frac{h}{2} - 0 \right), \quad s = 1, 2; \\ \frac{1}{2m_1} \left(\frac{\partial \psi_1(x, y, \pm h/2 + 0)}{\partial z} - \frac{\partial \psi_1(x, y, \pm h/2 - 0)}{\partial z} \right) = \alpha_1 \psi_1(x, y, \pm h/2) + \beta \psi_2(x, y, \pm h/2); \\ \frac{1}{2m_2} \left(\frac{\partial \psi_2(x, y, \pm h/2 + 0)}{\partial z} - \frac{\partial \psi_2(x, y, \pm h/2 - 0)}{\partial z} \right) = \alpha_2 \psi_2(x, y, \pm h/2) + \beta \psi_1(x, y, \pm h/2). \end{cases} \quad (6)$$

Нас будет интересовать область энергий, отвечающая свободно распространяющимся волнам первого типа и локализованным состояниям частицы второго типа, т.е.

Пусть частица распространяется вдоль двух одинаковых параллельных плоских дефектов, расположенных на расстоянии h параллельно общей плоскости симметрии двух законов дисперсии (1), (2). Тогда, в предположении о локальном характере дефектов, взаимодействие двух волн в простейшем случае описывается следующим образом [6]:

$$\begin{aligned} U_1 &= (\alpha_1 \psi_1 + \beta \psi_2) \left[\delta \left(z - \frac{h}{2} \right) + \delta \left(z + \frac{h}{2} \right) \right], \\ U_2 &= (\alpha_2 \psi_2 + \beta \psi_1) \left[\delta \left(z - \frac{h}{2} \right) + \delta \left(z + \frac{h}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (5)$$

где α_1, α_2 и β — параметры, определяющие характер взаимодействия рассматриваемых волн с отдельным дефектом. Поскольку гамильтониан такого взаимодействия обычно (в линейном приближении) квадратичен по ψ_1 и ψ_2 , из эрмитовости подобного гамильтониана следует, что число независимых множителей в упомянутой квадратичной форме равно трем. Величины и знаки параметров α_1, α_2 и β зависят, естественно, от типа плоского дефекта. Для электронов в качестве таких дефектов могут выступать плоскости, интеркалированные чужеродными атомами, для фононов — такие же плоскости, а также тонкие двойниковые прослойки или две границы толстого двойника (в этом случае пренебрегается различием упругих свойств материнского и сдвоенного кристаллов).

Если a_0 — толщина плоского дефекта (порядка величины межатомного расстояния), то в формулах все длины измеряются в единицах a_0 .

С уравнениями (3) и (4) совместны такие граничные условия на плоскостях $z = \pm h/2$:

$$\varepsilon_1 \equiv \frac{k_x^2 + k_y^2}{2m_1} < \varepsilon < \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_0 + \frac{(k_x - k_0)^2}{2m_3} + \frac{k_y^2}{2m_2}. \quad (7)$$

1. Мы ищем волну, распространяющуюся вдоль плоскости xy , имеющую волновой вектор $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ ($k_x = k \cos \varphi$, $k_y = k \sin \varphi$) и локали-

зованную вблизи пары дефектов. Возьмем решение в виде симметричной функции z :

$$\Psi_1 = \begin{cases} A \cos(k_z z) e^{i(k_x x + k_y y)} & |z| < h/2, \\ 0 & |z| > h/2; \end{cases} \quad (8)$$

$$\Psi_2 = \begin{cases} D \operatorname{ch} \kappa z e^{i(k_x x + k_y y)} & |z| < h/2, \\ B e^{-\kappa(|z| - h/2)} e^{i(k_x x + k_y y)} & |z| > h/2, \end{cases}$$

где

$$k_z^2 = 2m_1 \varepsilon - k^2, \quad (9)$$

$$\kappa^2 = 2m_2(\varepsilon_0 - \varepsilon) + k^2 \sin^2 \varphi + \frac{m_2}{m_3} (k \cos \varphi - k_0)^2.$$

Решение (8) описывает волну, распространяющуюся вдоль параллельных дефектов и «зажатую» между ними, т.е. фактически воспринимающую пару таких дефектов как плоский волновод.

Подставляя (8) в граничные условия (6), находим возможные дискретные значения k_z :

$$k_z = q(n) \equiv \frac{\pi}{h} (1 + 2n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

и получаем уравнения

$$A \frac{(-1)^n \pi}{2m_1 h} (1 + 2n) = D \beta \operatorname{ch} \left(\kappa \frac{h}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

$$1 + \operatorname{th} \left(\kappa \frac{h}{2} \right) = - \frac{2m_2 \alpha_2}{\kappa}. \quad (12)$$

Уравнение (11) определяет связь амплитуд A и D , а решения трансцендентного уравнения (12) позволяют найти то значение параметра κ , при котором изучаемая система обладает волноводными свойствами. Легко заметить, что вещественное решение уравнения (12) возможно лишь при $\alpha_2 < 0$, причем это решение существует при всех значениях положительных m_2 и отрицательных α_2 . При $\kappa h \ll 1$ получаем $\kappa \approx 2|\alpha_2| m_2$, что возможно, если $|\alpha_2| m_2 h \ll 1$. При $\kappa h \gg 1$ $\kappa \approx |\alpha_2| m_2$, что возможно при $|\alpha_2| m_2 h \gg 1$. Таким образом, всегда $\kappa \sim |\alpha_2| m_2$.

Найденные κ и k_z определяют с помощью уравнений (9) дискретный набор ($n = 0, 1, 2, \dots$) возможных значений энергии ε при фиксированном направлении волнового вектора, т.е. при фиксированном угле φ . Иначе, при заданной энергии ε и фиксированном номере n мы находим направления волнового вектора тех волн, которые могут быть «зажаты» между двумя дефектами.

Удобнее, однако, пользоваться связью величины волнового вектора k и угла φ . Зависимость k от φ в неявном виде задается следующим алгебраическим уравнением:

$$k^2 \left[1 - \frac{m_2}{m_1} + \cos^2 \varphi \left(\frac{m_2}{m_3} - 1 \right) \right] - 2 \frac{m_2}{m_3} k k_0 \cos \varphi + 2m_2 \varepsilon_0 - \frac{m_2 \pi^2}{m_1 h^2} (1 + 2n)^2 + \frac{m_2}{m_3} k_0^2 - \kappa^2 = 0. \quad (13)$$

Напомним, что $k_z = q(n)$ определяется формулой (10), а $\kappa(h)$ находится как решение уравнения (12). Полученная зависимость характеризуется четырьмя параметрами: k_0 , $m_2 \varepsilon_0$, m_2/m_1 и m_2/m_3 , значения которых существенно определяют вид функции $k = k(\varphi)$.

Обсуждая эти зависимости, уточним единицы измерения физических размерных величин, входящих в формулы. Выше отмечалось, что длины измеряются в межатомных расстояниях a_0 . Следовательно, волновые векторы измеряются в единицах $1/a_0$. Эффективные массы электрона естественно измерять в единицах электронных масс m_0 . Тогда энергия ε и параметры α и β измеряются в единицах $1/(m_0 a_0^2)$, т.е. в атомных единицах энергии (напомним, что $\hbar = 1$). Если речь идет о фонах (звуковых волнах), то $1/m$ измеряется в единицах квадратов фазовых скоростей звука s^2 , а квадрат частоты ε в единицах $(s/a_0)^2$, т.е. в единицах квадрата дебаевской частоты.

Проанализируем зависимость (13) в предельных случаях:

1. Допустим $k_0 = 0$, $m_2 \neq m_3$. Тогда

$$k^2 = \frac{\kappa^2 + (m_2/m_1) q^2(n) - 2m_2 \varepsilon_0}{1 - m_2/m_1 - (1 - m_2/m_3) \cos^2 \varphi}. \quad (14)$$

Здесь возможны следующие варианты:

а) При любом φ система будет играть роль плоского волновода для волн с волновым вектором, находящимся в определенном интервале (рис. 2). Это возможно, если числитель в (14) положительный и либо $m_3 < m_2 < m_1$, либо $m_2 < m_3 < m_1$. Если числитель в (14) отрицательный, то нужное условие выполняется при $m_1 < m_2 < m_3$ или $m_1 < m_3 < m_2$.

б) Для волны с любой энергией, большей некоторого ε^* , есть такой угол φ , при котором возникают волноводные свойства (рис. 3). Это будет при $m_2 < m_1 < m_3$ и $m_3 < m_1 < m_2$. Функция $\varepsilon(\varphi)$ в зависимости от знака числителя (14) может быть как возрастающей, так и убывающей.

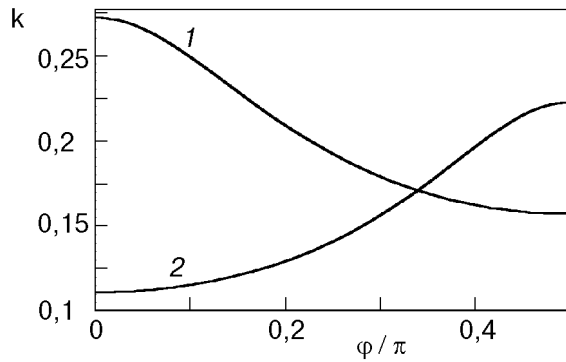


Рис. 2. Зависимость величины волнового вектора k от угла φ при $h = 20$, $\alpha_2 = -1$, $\varepsilon_0 = 0,5$, $m_2 = 1$, $n = 0$: $m_1 = 2$, $m_3 = 1,5$ (1), $m_1 = 1,5$, $m_3 = 0,5$ (2).

При других соотношениях параметров волновые свойства в такой системе не возникнут.

2. Другим предельным случаем является $m_2 = m_3$, $k_0 \neq 0$. Тогда

$$k(\varphi) = \frac{m_1}{m_1 - m_2} \left\{ k_0 \cos \varphi \pm \left[k_0^2 \cos^2 \varphi - \left(1 - \frac{m_2}{m_1} \right) (2m_2 \varepsilon_0 - (m_2/m_1)q^2(n) + k_0^2 - \kappa^2) \right]^{1/2} \right\}. \quad (15)$$

а) Пусть $m_1 = m_2$. При этом условии непосредственно из (13) следует

$$k(\varphi) = \frac{2m_2 \varepsilon_0 - q^2(n) + k_0^2 - \kappa^2}{2k_0 \cos \varphi}. \quad (16)$$

В зависимости от значения φ формула (16) имеет смысл для $\cos \varphi > 0$, если $q^2(n) + \kappa^2 < 2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2$, и для $\cos \varphi < 0$ при $q^2(n) + \kappa^2 > 2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2$.

б) При $m_1 > m_2$ должно выполняться условие

$$q^2(n) > \frac{m_1}{m_2} \left(2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2 - \frac{m_1 k_0^2}{m_1 - m_2} \right),$$

тогда возможны два случая:

1) Если $q^2(n) < (m_1/m_2)(2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2)$, то при любом $\cos \varphi > 0$ существуют два решения $k(\varphi)$, а при $\cos \varphi < 0$ решений нет.

2) Если $q^2(n) > (m_1/m_2)(2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2)$, то при любом φ есть одно решение $k(\varphi)$.

в) При $m_1 < m_2$ должно выполняться условие $q^2(n) < (m_1/m_2)[2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2 - m_1 k_0^2 / (m_1 - m_2)]$ и опять возможны два случая:

1) Если $q^2(n) < (m_1/m_2)(2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2)$, то при любом φ есть одно решение $k(\varphi)$.

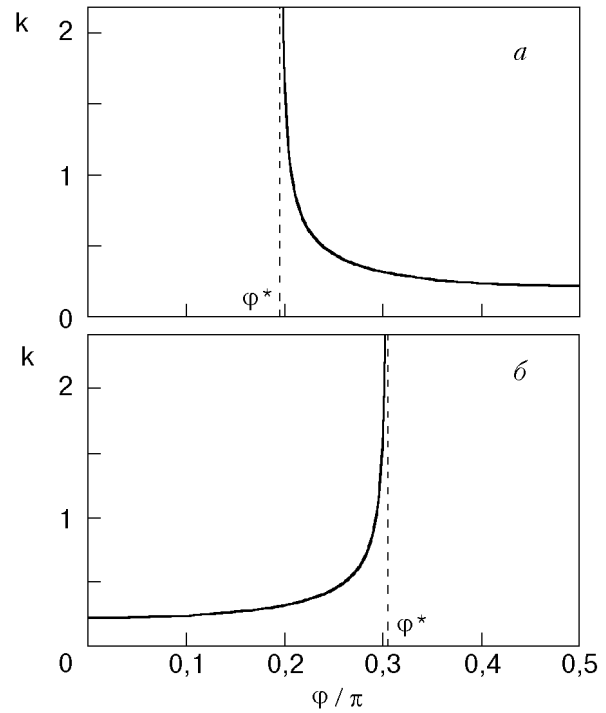


Рис. 3. Зависимость величины волнового вектора k от угла φ при $h = 20$, $\alpha_2 = -1$, $\varepsilon_0 = 0,5$, $m_2 = 1$, $n = 0$: $m_1 = 1,5$, $m_3 = 2$

(а), $m_1 = 0,75$, $m_3 = 0,5$ (б). $\varphi^* = \arccos \left[\frac{m_3(m_1 - m_2)}{m_1(m_3 - m_2)} \right]^{1/2}$.

2) Если $q^2(n) > (m_1/m_2)(2m_2 \varepsilon_0 + k_0^2 - \kappa^2)$, то при любом $\cos \varphi < 0$ существуют два решения $k(\varphi)$, а при $\cos \varphi > 0$ решений нет.

Специальный интерес представляет анализ случая $\varphi = 0$, поскольку он отвечает рассмотрению эффекта в $2D$ системе.

Перепишем (13) в более удобном виде:

$$k^2 \frac{m_1 - m_3}{m_1} - 2kk_0 + 2\varepsilon_0 m_3 - \frac{m_3}{m_1} q^2(n) - \frac{m_3}{m_2} \kappa^2 + k_0^2 = 0. \quad (17)$$

а) Если $m_1 = m_3$, то всегда существует одно такое k , при котором будет выполнено (17). (Здесь и далее анализ проводится при фиксированном n .)

б) При $m_1 < m_3$ и

$$h^2 > h_1^2 = \frac{\pi^2}{m_1} (1 + 2n)^2 \frac{m_3 - m_1}{k_0^2 + (m_3 - m_1)(2\varepsilon_0 - \kappa^2/m_1)}$$

есть два решения. Если $h^2 < h_1^2$, то решений нет.

в) Случай $m_1 > m_3$ и $m_1 - m_3 > k_0^2 / 2\varepsilon_0$. Если

$$h^2 \leq h_2^2 = \frac{\pi^2}{m_1} (1 + 2n)^2 \frac{m_1 - m_3}{2(m_1 - m_3)\epsilon_0 - k_0^2},$$

то есть два значения k , удовлетворяющих уравнению (17).

Если $h^2 > h_2^2$, то при малых $|\alpha_2|$ решений нет.

г) При $m_1 > m_3$ и $m_1 - m_3 < k_0^2/2\epsilon_0$ всегда есть два решения.

2. Рассмотрим теперь антисимметричное по z решение:

$$\Psi_1 = \begin{cases} A \sin(k_z z) e^{i(k_x x + k_y y)} & |z| < h/2, \\ 0 & |z| > h/2; \end{cases}$$

$$\Psi_2 = \begin{cases} B e^{-\kappa(z-h/2)} e^{i(k_x x + k_y y)} & z > h/2, \\ D \operatorname{sh} \kappa z e^{i(k_x x + k_y y)} & |z| < h/2, \\ -B e^{\kappa(z+h/2)} e^{i(k_x x + k_y y)} & z < -h/2. \end{cases} \quad (18)$$

Подставляя (18) в граничные условия (6), получаем

$$k_z = \tilde{q}(n) \equiv \frac{2\pi n}{h}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (19)$$

$$A \frac{(-1)^{n+1} \pi n}{2m_1 h} = D\beta \operatorname{sh} \left(\kappa \frac{h}{2} \right), \quad (20)$$

$$1 + \operatorname{cth} \left(\kappa \frac{h}{2} \right) = -\frac{2m_2 \alpha_2}{\kappa}. \quad (21)$$

Соотношения (19)–(21) аналогичны по своему смыслу соотношениям (10)–(12). Уравнение (21) имеет решения при $\alpha_2 < 0$ и при $|\alpha_2| m_2 h > 1$. В остальном анализ антисимметричного случая подобен анализу симметричного.

Если $\epsilon_2 < \epsilon_1$, не представляет сложности рассмотреть область энергий $\epsilon_2 < \epsilon < \epsilon_1$, в которой волны первого типа локализованы, а волны второго типа свободно распространяются (ϵ_1 может быть больше ϵ_2 , например при $m_1 \ll m_2, m_3$).

В этом интервале энергий два плоских дефекта также будут обладать волноводными свойствами.

Таким образом, показано, что два параллельных плоских дефекта могут обладать волноводными свойствами по отношению к волне, имеющей закон дисперсии с двумя ветвями, если ее энергия отвечает свободно распространяющимся состояниям одной ветви и локализованным состояниям другой ветви. В зависимости от ориентации волнового вектора этой волны по отношению к выделенным направлениям изоэнергетической поверхности между дефектами будут «зажаты» волны, энергии которых лежат в широком диапазоне. В двумерном случае между такими дефектами будут локализованы волны с дискретным набором энергий, зависящим от соотношения параметров закона дисперсии.

1. А. М. Косевич, С. Е. Савотченко, *ФНТ* **25**, 737 (1999).
2. C. S. Chu and R. S. Sorbello, *Phys. Rev.* **B40**, 5941 (1989).
3. Y. B. Levinson, M. I. Lubin, and E. V. Sukhorukov, *Pis'ma Zn. Eksp. Teor. Fiz.* **54**, 405 (1991).
4. C. T. Liang, I. M. Castelton, J. E. F. Frost, C. H. W. Barnes, C. G. Smith, C. J. B. Ford, D. A. Ritchie, and M. Pepper, *Phys. Rev.* **B55**, 6723 (1997).
5. M. W. Dellow, P. H. Beton, C. J. G. M. Langerak, T. J. Foster, P. C. Main, L. Eaves, M. Henini, S. P. Beaumont, and C. D. W. Wilkinson, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1754 (1992).
6. А. М. Косевич, *ЖЭТФ* **115**, 306 (1999).
7. Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, *ЖЭТФ* **115**, 211 (1999).

Waveguide properties of two parallel defects at twochannel scattering conditions

A. M. Kosevich and D. V. Matsokin

It is shown that two parallel plane defects in a crystal have a waveguide properties for a quantum particle which has two branches of the dispersion law. A range of energies (or frequencies) in which the excitations are localized between defects and propagate along them is determined. In a 2D system the excitations with a discrete number of energies can be localized between parallel linear defects.