第 48 卷 第 11 期 1999 年 11 月
1000-3290/1999/48(11)/2125-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 48, No. 11, November, 1999

用非线性薛定谔方程讨论超晶格中畴的运动

田 强 马本堃
(北京师范大学物理系, 北京 100875)
(1998 年 11 月 27 日收到)

用非线性薛定谔方程讨论超晶格畴的形成和漂移, 得到具有负微分电导特性的超晶格中畴的波函数是 Bloch 函数的一个孤子型包络函数, 它在外电场作用下做漂移运动.

PACC: 7220H; 7230; 0560; 0365

1 引 言

负微分电导特性是晶体和超晶格输运性质的一个重要方面. 1969 年[1] 首次提出超晶格的概念, 并在实验和理论上对其输运特性进行了研究, 得到了超晶格的负微分电导特性, 之后这方面的实验和理论研究一直受到人们的关注[2,3]. 1974 年 Esaki 和 Chang[4] 实验观察到超晶格畴的形成和漂移, 超晶格畴运动的锁频和混沌行为也越来越受到人们的重视[5].

Gunn 效应[6,7] 也是畴的漂移和渡越, 虽然 Gunn 效应中畴的形成机制(Gunn 效应中畴的形成是由于不同迁移率的不等价能谷之间的转移电子效应) 与超晶格中畴的形成机制不同, 但唯象地都与负微分电导特性有关.

非线性薛定谔方程是一个重要的非线性演化方程, 近年来在孤子理论中不断得到应用和发展[8], 特别是比较成功地用于分析周期系统中的孤子现象[9,10].

本文用非线性薛定谔方程讨论超晶格畴的形成和漂移, 得到具有负微分电导特性的超晶格中畴的波函数是 Bloch 函数的一个孤子型包络函数, 它在外电场作用下做漂移运动.

2 哈密顿算符及其讨论

由于实际晶体或超晶格的不完整性, 会产生电子密度的不均匀, 负微分电导特性使电子密度的不均匀进一步增大, 生长为电偶极畴(例如, III-V族化合物晶体中的 Gunn 效应[6,7]) 或单极畴(超晶格中[4,5]).

对于超晶格中畴的形成和生长, 在此不具体讨论其微观机制, 唯象地把畴形成和生长过程用一个自陷势(self-trapped potential) 来表达[8], 即由于某种不完整性, 使阴极附近电子密度产生微小的聚集, 该处电场强度增大, 由于负微分电导效应, 该处电子飘移速度减小, 使电子的聚集进一步增大[5,7]. 这种畴形成和生长的过程可以在哈密顿算符中用一个

与电子密度$|\phi(x,t)|^2$成正比的自陷势来表示.

这样,超晶格中畴生长和运动的哈密顿算符为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 - u(x) + eFx - \kappa|\phi(x)|^2, \tag{1}$$

其中$u(x+a)=u(x)$是超晶格的周期势场,a是超晶格的周期,F是外加电场(沿负x方向),$e=|e|$是电子电量,$\kappa|\phi(x)|^2$是自陷势,κ是比例实常数.

相应的薛定谔方程为(取单位 $\hbar=2m=e=1$)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,t) + u(x)\phi(x,t) - Fx\phi(x,t) + \kappa|\phi(x,t)|^2\phi(x,t) = 0. \tag{2}$$

3 约化微扰方法(reductive perturbation method)[10]与非线性薛定谔方程

首先对(2)式进行如下变换:

$$\phi(x,t) = \phi'(x',t')\exp\left[-\mathrm{i}Fxt - \frac{1}{3}\mathrm{i}F^2t^3\right], \quad x = x' - Ft'^2, \quad t = t', \tag{3}$$

代入(2)式,消去各项中的指数因子$\exp\left[-\mathrm{i}Fxt - \frac{1}{3}\mathrm{i}F^2t^3\right]$,由于

$$\frac{\partial\phi'(x',t')}{\partial t'} = \frac{\partial\phi'(x',t')}{\partial t} - 2Ft\frac{\partial\phi'(x',t')}{\partial x},$$

(2)式成为

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t'}\phi'(x',t') + \frac{\partial^2}{\partial x'^2}\phi'(x',t') + u(x'-Ft'^2)\phi'(x',t')\\&+\kappa|\phi'(x',t')|^2\phi'(x',t') = 0,\end{aligned} \tag{4}$$

即

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\phi'(x+Ft^2,t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi'(x+Ft^2,t) + u(x)\phi'(x+Ft^2,t)\\&+\kappa|\phi'(x+Ft^2,t)|^2\phi'(x+Ft^2,t) = 0.\end{aligned} \tag{5}$$

令$\Phi(x,t)=\phi'(x+Ft^2,t)$,在不考虑非线性项$\kappa|\Phi(x,t)|^2\Phi(x,t)$时,(5)式形式上就是周期势场为$u(x)$的超晶格电子线性薛定谔方程,其本征解为Bloch波

$$\phi_{\omega(k)}(x,t) = Y(x,\omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t), \tag{6}$$

其中$Y(x+a,\omega)=Y(x,\omega)\exp(\mathrm{i}ka)$,实常数即波矢$k$与角频率$\omega$之间由色散关系$\omega(k)$相联系.

由于系统是线性的,其一般解可以表示为积分形式

$$\Phi(x,t) = \int_0^\infty \rho(\omega)\mathrm{Re}(Y(x,\omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t))\,\mathrm{d}\omega. \tag{7}$$

$\rho(\omega)$是态密度.

采用约化微扰方法,假定态密度$\rho(\omega)$主要分布于$\omega=\omega_0$附近,引入Ω和$\rho(\Omega)$

如下:

$$\omega = \omega_0 + \varepsilon\Omega, \tag{8}$$

$$\rho(\omega) = \varepsilon^{-1}\rho(\Omega), \tag{9}$$

其中 ε 是小量. 将(7)式展开为 ε 的微扰幂级数

$$\begin{aligned}\phi(x, t) = {} & Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\phi_+^{(1)} + Y^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\phi_-^{(1)} \\ & + \varepsilon V(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\phi_+^{(2)} + \varepsilon V^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\phi_-^{(2)} \\ & + \varepsilon^2 W(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\phi_+^{(3)} + \varepsilon^2 W^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\phi_-^{(3)} + O(\varepsilon^3),\end{aligned} \tag{10}$$

其中

$$V(x, \omega) = \exp(\mathrm{i}kx)\frac{\partial}{\partial\omega}(Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}kx)), \tag{11a}$$

$$W(x, \omega) = \exp(\mathrm{i}kx)\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\omega^2}(Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}kx)), \tag{11b}$$

$$\phi_\pm^{(j)} = \int \mathrm{d}\Omega\rho(\Omega)\Omega^{j-1}\exp\left(\pm\mathrm{i}\left[\Omega\varepsilon\left[\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}x - t\right] + \Omega^2\frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2k}{\mathrm{d}\omega^2}x\right]\right) \quad (j = 1, 2, 3). \tag{12}$$

引入两个新的独立变量 ξ 和 τ

$$\xi = \varepsilon\left[\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}x - t\right], \quad \tau = \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2k}{\mathrm{d}\omega^2}x, \tag{13}$$

(12)式用新的变量表示为

$$\phi_\pm^{(j)}(\xi, \tau) = \int \mathrm{d}\Omega\rho(\Omega)\Omega^{j-1}\exp(\pm\mathrm{i}(\Omega\xi + \Omega^2\tau)). \tag{14}$$

由(14)式易知, $\phi_\pm^{(1)}(\xi, \tau)$满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial\phi_\pm^{(1)}}{\partial\tau} = \pm\frac{\partial^2\phi_\pm^{(1)}}{\partial\xi^2}, \tag{15}$$

则展开式(10)用包络函数 $\phi_\pm^{(1)}(\xi, \tau)$表示为

$$\begin{aligned}\phi(x, t) = {} & Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\phi_+^{(1)} + Y^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\phi_-^{(1)} \\ & + \varepsilon V(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)(-i)\frac{\partial\phi_+^{(1)}(\xi, \tau)}{\partial\xi} + \varepsilon V^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)i\frac{\partial\phi_-^{(1)}(\xi, \tau)}{\partial\xi} \\ & + \varepsilon^2 W(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)(-1)\frac{\partial^2\phi_+^{(1)}(\xi, \tau)}{\partial\xi^2} \\ & + \varepsilon^2 W^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)(-1)\frac{\partial^2\phi_-^{(1)}(\xi, \tau)}{\partial\xi^2} + O(\varepsilon^3).\end{aligned} \tag{16}$$

展开式(16)直到 $O(\varepsilon^2)$在下述规范变换下不变:

$$\tau \to \tau + \varepsilon^2\chi(x, \omega), \tag{17a}$$

$$W(x, \omega) \to W(x, \omega) - \mathrm{i}\chi(x, \omega)Y(x, \omega), \tag{17b}$$

$$W^*(x, \omega) \to W^*(x, \omega) + \mathrm{i}\chi(x, \omega)Y^*(x, \omega), \tag{17c}$$

其中函数 $\chi(x, \omega)$是满足下述条件的任意函数:

$$\chi(x + a, \omega) = \chi(x, \omega). \tag{18}$$

对于非线性项存在时, 方程(5)的波函数记为 $\Phi(x, t)$, 这里只讨论满足以下两种情况:

1) 波函数振幅小但为有限, 非线性效应弱但不能忽略;

2) 波函数是 Bloch 波的慢调制函数. Bloch 波的波长 $l_B = 2\pi/k$ 与超晶格周期 a 同数量级, 即

$$a \sim l_B = 2\pi/k \ll l_E, \tag{19}$$

其中 l_E 是包络波函数的特征波长.

在本文所讨论的情况下, 波函数 $\Phi(x, t)$ 的模是小量($\sim O(\varepsilon)$), 对于 $\Phi(x, t)$ 近似地可采用与(16)式几乎相同的微扰展开式[10]

$$\begin{aligned}\Phi(x, t) = & \varepsilon Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)U(\xi, \tau) + \varepsilon Y^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\bar{U}(\xi, \tau) \\ & + \varepsilon^2 V(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)(-\mathrm{i})\frac{\partial U(\xi, \tau)}{\partial \xi} + \varepsilon^2 V^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\mathrm{i}\frac{\partial \bar{U}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \\ & + \varepsilon^3 W(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)(-1)\frac{\partial^2 U(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} + \varepsilon^3 \bar{W}(x, \omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)(-1)\frac{\partial^2 \bar{U}(\xi, \tau)}{\partial \xi^2} \\ & + \varepsilon^3 X(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}3\omega t)(U(\xi, \tau))^3 + \varepsilon^3 X^*(x, \omega)\exp(\mathrm{i}3\omega t)(\bar{U}(\xi, \tau))^3 + O(\varepsilon^4),\end{aligned} \tag{20}$$

其中 $Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ 是 Bloch 函数, $U(\xi, \tau)$ 是在忽略 $O(\varepsilon^2)$ 近似下 Bloch 函数的包络函数.

将展开式(20)代入方程(5), 比较 $\varepsilon^n \exp(-\mathrm{i}l\omega t)$ ($n = 1, 2, 3, \dots, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) 的系数.

当 $n = 1$, $l = \pm 1$ 以及当 $n = 2$, $l = \pm 1$ 时, 得到关于 $Y(x, \omega)$ 的定态薛定谔方程及其对 ω 导数的方程.

当 $n = 3$, $l = \pm 3$ 时, 得到关于 $X(x, \omega)$ 的方程

$$-9\omega^2 X(x, \omega) - \frac{\partial^2 X(x, \omega)}{\partial x^2} + u(x)X(x, \omega) + \kappa Y^3(x, \omega) = 0. \tag{21}$$

当 $n = 3$, $l = 1$ 时, 得到

$$\mathrm{i}P(x, \omega)\left[\mathrm{i}\frac{\partial U}{\partial \tau} - \frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2}\right] + 3\kappa|Y(x, \omega)|^2 Y(x, \omega)U^2\bar{U} = 0, \tag{22}$$

其中

$$P(x, \omega) = \frac{1}{Y(x, \omega)}\frac{\partial}{\partial x}\left[Y^2(x, \omega)\left[\frac{\partial \chi(X, \omega)}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{k}}{\mathrm{d}\omega^2}\right]\right]. \tag{23}$$

由于函数 $\chi(x, \omega)$ 是满足(18)式的任意函数, 可以令

$$3\kappa|Y(x, \omega)|^2 Y(x, \omega) = \mathrm{i}bP(x, \omega), \tag{24}$$

则得到关于包络函数 U 的非线性薛定谔方程

$$\mathrm{i}\frac{\partial U}{\partial \tau} - \frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2} + bU^2\bar{U} = 0, \tag{25}$$

其中常数 b 和函数 $\chi(x, \omega)$ 由(23)和(24)式确定为

$$b = -3\left[a\frac{\mathrm{d}^2 k}{\mathrm{d}\omega^2}\right]^{-1}\frac{\kappa\exp(-\mathrm{i}ka)}{\sin(ka)}\int_{x_0}^{a+x_0}\mathrm{d}x' Y^{-2}(x')\int_{x'}^{x'+a}\mathrm{d}x''|Y(x'')|^2 Y^2(x''), \tag{26}$$

$$\chi(x, \omega) = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 k}{\mathrm{d}\omega^2}x - \frac{3\kappa\exp(-\mathrm{i}ka)}{2b\sin(ka)}\int_0^x \mathrm{d}x' Y^{-2}(x')\int_{x'}^{x'+a}\mathrm{d}x''|Y(x'')|^2 Y^2(x''). \tag{27}$$

(26)式积分限上的 x_0 是一个任意实常数, 不影响常数 b 的数值. 在导出(27)式时, 为使 $\chi(x, \omega)$ 比较简明, 取 $\chi(0, \omega)=0$, 显然, (27)式确定的函数 $\chi(x, \omega)$ 满足(18)式.

4　超晶格中的畴

在(20)和(25)式中, $Y(x, \omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)$ 是周期为 a 的超晶格中的 Bloch 函数, U 是它的包络函数. 可以证明 $b^* = b$, 即 b 是实的, 且 $b<0$. 众所周知[11], 对于实的负常数 b, 非线性薛定谔方程(25)有孤子解

$$U = \sqrt{\frac{-2}{b}}\,2\eta\,\mathrm{sech}\,2\eta(\xi(x, t) - 4\mu\tau(x))\exp(-2\mathrm{i}\mu\xi(x, t) + 4\mathrm{i}(\mu^2 - \eta^2)\tau(x)), \tag{28}$$

其中 η 是孤子幅度, $v = -4\mu$ 是孤子运动速度, η 和 μ 由初始条件和具体情况确定.

以上基于负微分电导特性, 在一定近似下证明了有畴产生的超晶格中的电子波函数是调幅的 Bloch 函数, 其包络函数满足非线性薛定谔方程, 有孤子解, 与超晶格中的畴相对应. Bulashenko 等人[5]同样基于负微分电导特性, 对 40 个周期的超晶格写出 40 个差分方程组成的差分方程组, 用 Runge-Kutta 法数值求解, 也得到超晶格中畴的形成和运动. Bulashenko 等人还进一步讨论了在交流电场作用下畴运动的混沌行为.

[1]　L. Esaki, R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.*, **14**(1970), 61.

[2]　S. H. Kwok, T. B. Norris, L. L. Bonilla *et al.*, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 10171.

[3]　Tian Qiang, Ma Ben-kun, *Commun. Theor. Phys.*, **29**(1998), 535.

[4]　L. Esaki, L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.*, **33**(1974), 495.

[5]　O. M. Bulashenko, M. J. Garcia, L. L. Bonilla, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 10008.

[6]　E. Mosekilde, J. S. Thomsen, C. Knudsen *et al.*, *Physica*, **D66**(1993), 143.

[7]　Qiang Tian, Ben-kun Ma, *Phys. Rev.*, **B55**(1997), 15390.

[8]　庞小峰, 非线性量子力学理论(重庆出版社, 重庆, 1994)[Pang Xiao-feng, Theory of Nonlinear Quantum Mechanics (Chongqing Press, Chongqing, 1994)(in Chinese)].

[9]　V. G. Makhankov, A. R. Bishop, D. D. Holm, Nonlinear Evolution Equations & Dynamical Systems(World Scientific, Singapore, 1994).

[10]　Qiang Tian, Ben-kun Ma, *Physica*, **A259**(1998), 59.

[11]　F. Abdullaev, S. Darmanyan, P. Khabibullaev, *Optical Solitons*(Springer-Verlag, Berlin, 1993).

THE FORMATION AND PROPAGATION OF DOMAINS IN SUPERLATTICES DISCUSSED WITH NONLINEAR SCHRÖDINGER EQUATION

TIAN QIANG MA BEN-KUN
(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing* 100875)
(Received 27 November 1998)

ABSTRACT
The formation and propagation of domains in superlattices are discussed using a nonlinear Schrödinger equation. Negative differential conductivity in superlattices leads to the growth of inevitable spatial fluctuations, and a propagating electron accumulation-layer domain is formed. It is shown that envelopes of the wave functions are governed by the nonlinear Schrödinger equation which has soliton solutions.

PACC: 7220H; 7230; 0560; 0365