ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2017 апрель–июнь № 2 (35)

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 539.2+537.226

ЗОННАЯ СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ПРОТОНА В ДИЭЛЕКТРИКАХ С ПРОТОННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ

В.А. Калытка[1], З.К. Баймуханов[2], А.И. Алиферов[3], А.Д. Мехтиев[1]
[1]*Карагандинский государственный технический университет*
[2]*Евразийский Национальный университет им. Л.Н. Гумилева*
[3]*Новосибирский государственный технический университет*

В квазиклассическом приближении методом Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ-методом) исследуются квантовые свойства протонной подсистемы (взаимодействующей с анионной подрешеткой) в кристаллах с водородными связями (КВС) в области низких температур (70–100 К). Математическая модель строится на решении стационарного уравнения Шрёдингера для частицы (протона), двигающейся в поле невозмущенного внешним (поляризующим) полем одномерного периодического потенциала, для случая омических контактов на границах кристалла (работа выхода протона за пределы диэлектрика является конечной величиной). Построены рекуррентные формулы для амплитуд волновых функций протона в области произвольной потенциальной ямы, или барьера, для модели невозмущенного потенциального рельефа параболической формы. Выявлена зонная структура энергетического спектра протона в КВС, получены выражения для расчета максимальной энергии («потолок» зоны), минимальной энергии («дно» зоны) и ширины энергетической зоны, соответствующей заданному стационарному состоянию протона в изолированной потенциальной яме. Установлено прямое влияние прозрачности потенциального барьера на параметры зонной структуры энергетического спектра протона. С помощью аппарата статистической матрицы записаны выражения для заселенностей невозмущенных уровней энергии в пределах фиксированной энергетической зоны. Рассчитаны фазы квазиклассических волновых функций протона. Результаты работы найдут применение при детальном теоретическом исследовании механизма квантовой (туннельной) протонной проводимости с целью разработки элементов электрохимических устройств (твердые электролиты), топливных элементов водородной энергетики, элементов микросхем контрольно-измерительных и анализирующих устройств, работающих в условиях низких и сверхнизких температур.

Ключевые слова: кристаллы с водородными связями (КВС), зонная структура энергетического спектра протона в КВС, квазиклассическое приближение в квантовой механике, равновесная матрица плотности для протонов, волновые функции стационарных состояний протона в КВС.

DOI: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31

Введение

Закономерности поведения спектров $\mathrm{tg}\delta(\omega; T)$ и плотности термостимулированных токов поляризации (ТСТП) и деполяризации (ТСТД) в КВС достаточно хорошо исследованы в области высоких температур ($T \approx 100-250$ К) [1], когда основной вклад в поляризацию вносят термически активируемые (классические) переходы протонов через потенциальный барьер [2]. Скорость вероятности этих переходов при $T > 100$ К, в экспериментальном интервале изменения напряженности поляризующего поля $E_0 \approx 100$–1000 кВ/м, в любом приближении l по безразмерному параметру $\zeta_0 = \dfrac{qE_0 a}{2k_B T} < 1$, определяется законом Аррениуса

$W^{(0)} = W^{(1)} = ... = W^{(l)} \approx \frac{\nu_0}{2} \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T}\right)$ [3], где $a-$ постоянная решетки, ν_0- линейная частота собственных колебаний протона в изолированной потенциальной яме, U_0- высота потенциального барьера (энергия активации протона на водородной связи), $q-$ заряд протона [2, 3]. Невозмущенный спектр энергий $E_n^{(0)}$ протонов [4, 5], активированных при $T > 100$ К, принят квазинепрерывным, когда $\left|E_{n\pm1}^{(0)} - E_n^{(0)}\right| = h\nu_0 << k_B T$, $\left|\Delta E_{n,n\pm1}^{(0)}\right| \to 0$ [2, 3].

В области низких $(T \approx 70-100\ \text{К})$ [4, 5] и тем более сверхнизких $(T \approx 4-25\ \text{К})$ [6, 7] температур кинетические коэффициенты $W^{(l)}$ [3] вычисляются с учетом доминирующего влияния квантовых (туннельных) переходов протонов при поляризации диэлектрика, когда, в l-приближении по параметру ζ_0 выполняются выражения $W^{(l)} \to W_{\text{tunn}}^{(l)} = \frac{\nu_0}{2}\left\langle \mathrm{D}^{(l)} \right\rangle$, где $\left\langle \mathrm{D}^{(l)} \right\rangle = \frac{\Lambda^l \exp(-\Lambda) - \mathrm{X}^l \exp(-\mathrm{X})}{\mathrm{X}^{l-1}(\mathrm{X}-\Lambda)}$, $X = \frac{U_0}{k_B T}$, $\Lambda = \frac{\pi\delta_0\sqrt{mU_0}}{\hbar\sqrt{2}}$, δ_0- ширина потенциального барьера; m – масса протона [3]. Однако, авторами [3] статистическое усреднение прозрачности $D^{(l)}(U_0; E)$ проводилось, как и в [1, 2], в предположении квазинепрерывности энергетического спектра релаксаторов (протонов).

При этом в области температур $T < 100$ К из-за больших значений прозрачности $D\left(U_0; E_n^{(0)}\right)$ [2] расстояние между соседними уровнями энергии существенно возрастает: $\left|E_{n,n\pm1}^{(0)} - E_n^{(0)}\right| \neq 0$ и спектр энергий протона становится квазидискретным: $E_n^{(0)}(U_0; \nu_0; a; \delta_0)$ [4, 5]. Тогда расчет функции $\left\langle D\left(U_0; E_n^{(0)}\right)\right\rangle$ должен проводиться в числах заполнения, с помощью статистической матрицы $w_n^{(0)} = \left(a_n^{(0)}\right)^+ a_n^{(0)}$ [8]. В принципе, эта задача уже решена в приближении Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (ВКБ-методом), но для модели *прямоугольного* потенциального рельефа и при *блокирующих контактах* на границах исследуемого образца (диэлектрика) [2].

Цель данной работы сводится к исследованию структуры и квантовых свойств энергетического спектра и волновых функций релаксаторов (в КВС – протонов), двигающихся в одномерном кристаллическом потенциальном поле *параболической формы* при *омических контактах* на границах кристалла (работа выхода протона из диэлектрика является конечной величиной $U_{\max} > U_0$). Для модели блокирующих контактов, когда не допускается просачивание носителей заряда через границы диэлектрика, эта величина принимается бесконечно большой $\left(U_{\max} \to \infty\right)$ [2].

Выражения для волновых функций $\psi_n(\vec{r})$ и энергетического спектра $E_n^{(0)}$ невозмущенных стационарных состояний протона могут быть использованы при расчете заселенностей уровней энергии и при полном квантово-механическом усреднении (по пространственным переменным и по энергиям) измеряемых величин (поляризация, плотность тока термостимулированной деполяризации и др.).

1. Энергетический спектр протона в КВС

Моделируя гамильтониан кристалла, с учетом допущений, принятых для квантовой модели протонной релаксации, в КВС [2, 4, 5], уравнение Шрёдингера для протона массы m, двигающегося с энергией E в одномерном периодическом потенциальном поле водородных связей $\hat{U}_C(x)$ [3], запишем в простом виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\hat{U}_C(x)\psi=E\psi\,. \tag{1}$$

В данной модели координатная ось OX выбрана по направлению кристаллической оси C (перпендикулярно плоскостям спайности) [2, 3]. Область изменения координаты $-\infty<x<\infty$ включает отрезок $0\le x\le d$, где $d-$ толщина диэлектрика. Значения энергии частицы (протона) изменяются в интервале $0\le E<\infty$, где связанным состояниям протона, с энергией активации U_0, соответствует интервал $0\le E\le U_0$, а при энергиях $U_0\le E\le U_{\max}$ протон находится вне локального поля водородных связей, но в пределах потенциального поля кристаллической решетки с работой выхода $U_{\max}>U_0$. Условие нормировки для уравнения (1) гласит, что $\int\limits_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2=1$, где основная доля вероятности обнаружения протона равна $\Delta W(0;\,d)=\int\limits_0^d|\psi|^2\approx 1$.

В случае движения релаксатора (протона) в поле параболического потенциального рельефа, принимая энергию активации в виде $U_0=m\omega_0^2\delta_0^2/8$ [3], где $\omega_0=2\pi\nu_0$ – круговая частота собственных колебаний протона в невозмущенной изолированной потенциальной яме, запишем условие применимости квазиклассического приближения (ВКБ-метода) $U_0>>E_0^{(0)}$ [2], $E_0^{(0)}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ – энергия нулевых колебаний протона, в виде [3]

$$m\omega_0\delta_0^2/4\hbar>>1\,. \tag{2}$$

Тогда, волновая функция протона в области j-й потенциальной ямы $a_j\le x\le b_j$, согласно ВКБ-методу, принимает вид [2]

$$\breve{\psi}_j(x)=\frac{\breve{C}_j}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{a_j}^{x}p(x)dx\right)+\frac{\breve{D}_j}{\sqrt{p(x)}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int\limits_{a_j}^{x}p(x)dx\right). \tag{3}$$

Соответственно, в области j-го потенциального барьера $b_j\le x\le a_{j+1}$,

$$\widehat{\psi}_j(x)=\frac{\widehat{C}_j}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{b_j}^{x}|p(x)|dx\right)+\frac{\widehat{D}_j}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{b_j}^{x}|p(x)|dx\right). \tag{4}$$

В [2] построены рекуррентные выражения:

$$\begin{pmatrix}\hat{C}_{j+1}\\ \hat{D}_{j+1}\end{pmatrix}\equiv B\times\begin{pmatrix}\hat{C}_j\\ \hat{D}_j\end{pmatrix},\ B=\begin{pmatrix}b_{11} & b_{12}\\ b_{21} & b_{21}\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}\hat{C}_j\\ \hat{D}_j\end{pmatrix}=B^j\times\begin{pmatrix}\hat{C}_0\\ \hat{D}_0\end{pmatrix},$$

$$B^j=\begin{pmatrix}(B^j)_{11} & (B^j)_{12}\\ (B^j)_{21} & (B^j)_{22}\end{pmatrix}. \qquad (5)$$

В (5) приняты обозначения:

$$b_{11}=\frac{1}{2}e^{-\eta}\cos\varphi\,,\ b_{12}=e^{\eta}\sin\varphi\,, b_{21}=-e^{-\eta}\sin\varphi\,, b_{22}=2e^{\eta}\cos\varphi\,,$$

$$\varphi=\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_j}^{b_j}p(x)dx\,,\ \eta=\frac{1}{\hbar}\int\limits_{b_j}^{a_{j+1}}|p(x)|\,dx\,.$$

Используем равенство [2]

$$B^j=\frac{1}{\lambda_1-\lambda_2}\begin{pmatrix}(\lambda_1-b_{11})\lambda_2^j-(\lambda_2-b_{11})\lambda_1^j & -\dfrac{(\lambda_1-b_{11})(\lambda_2-b_{11})}{b_{21}}\left(\lambda_1^j-\lambda_2^j\right)\\ b_{21}\left(\lambda_1^j-\lambda_2^j\right) & (\lambda_1-b_{11})\lambda_1^j-(\lambda_2-b_{11})\lambda_2^j\end{pmatrix}. \qquad (6)$$

Совместно с детерминантом [2]

$$\begin{vmatrix}b_{11}-\lambda & b_{12}\\ b_{21} & b_{22}-\lambda\end{vmatrix}=0\,, \qquad (7)$$

обозначая

$$b_{11}+b_{22}=\left(\frac{1}{2}e^{-\eta}+2e^{\eta}\right)\cos\varphi=2\cos u,\ b_{11}b_{22}-b_{12}b_{21}=1,$$

$$\lambda_{1,2}=\exp(\pm iu), \qquad (8)$$

запишем элементы:

$$(B^j)_{11}=\frac{b_{11}\sin(ju)-\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u}\,,$$

$$(B^j)_{12}=-\frac{\left(1-2b_{11}\cos u+b_{11}^2\right)\sin(ju)}{b_{21}\sin u}=\frac{b_{12}\sin(ju)}{\sin u}\,, \qquad (9)$$

$$(B^j)_{21}=\frac{b_{21}\sin(ju)}{\sin u},\ (B^j)_{22}=\frac{\sin\left((j+1)u\right)}{\sin u}-b_{11}\frac{\sin(ju)}{\sin u}\,.$$

Полагая $\begin{pmatrix}\hat{C}_0\\ \hat{D}_0\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}0\\ Ce^{-\eta}\end{pmatrix}$ [2], из (5), с учетом (9), имеем

$$\begin{pmatrix} \widehat{C}_j \\ \widehat{D}_j \end{pmatrix} = B^j \begin{pmatrix} 0 \\ Ce^{-\eta} \end{pmatrix} = Ce^{-\eta} \begin{pmatrix} \dfrac{b_{12}\sin(ju)}{\sin u} \\ \dfrac{\sin\left((j+1)u\right) - b_{11}\sin(ju)}{\sin u} \end{pmatrix}, \qquad (10)$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{C}_{j-1} \\ \widehat{D}_{j-1} \end{pmatrix} = Ce^{-\eta} \begin{pmatrix} \dfrac{b_{12}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} \\ \dfrac{\sin(ju) - b_{11}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} \end{pmatrix}. \qquad (11)$$

Далее, используя равенство [2]

$$\begin{pmatrix} \breve{C}_j \\ \breve{D}_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{2} e^{-\eta - i\frac{\pi}{4}} \widehat{C}_{j-1} + \widehat{D}_{j-1} e^{\eta + i\frac{\pi}{4}} \\ \dfrac{1}{2} e^{-\eta + i\frac{\pi}{4}} \widehat{C}_{j-1} + \widehat{D}_{j-1} e^{\eta - i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix}, \qquad (12)$$

с учетом (11), получим

$$\begin{pmatrix} \breve{C}_j \\ \breve{D}_j \end{pmatrix} = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \dfrac{1-i}{2} e^{-2\eta} \dfrac{b_{12}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} + (1+i) \dfrac{\sin(ju) - b_{11}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} \\ \dfrac{1+i}{2} e^{-2\eta} \dfrac{b_{12}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} + (1-i) \dfrac{\sin(ju) - b_{11}\sin\left((j-1)u\right)}{\sin u} \end{pmatrix}. \qquad (13)$$

Выделим из (13) рекуррентные формулы

$$\breve{C}_j = \frac{C}{\sqrt{2}\sin u} \left\{ \frac{e^{-\eta}}{2} \sin\left((j-1)u\right)(\sin\varphi - \cos\varphi) + \sin(ju) + \right.$$

$$\left. + i\left(\sin(ju) - \frac{e^{-\eta}}{2} (\cos\varphi + \sin\varphi) \sin\left((j-1)u\right) \right) \right\}, \qquad (14)$$

$$\breve{D}_j = \frac{C}{\sqrt{2}\sin u} \left\{ \frac{e^{-\eta}}{2} \sin\left((j-1)u\right)\left(\sin\varphi - \cos\varphi\right) + \sin(ju) + \right.$$

$$\left. + i\left(\frac{e^{-\eta}}{2} \left(\cos\varphi + \sin\varphi\right) \sin\left((j-1)u\right) - \sin(ju) \right) \right\}. \qquad (15)$$

С целью проверки полученных равенств (14), (15), запишем формулу (12), с учетом (11), принимая j = 1: $\begin{pmatrix} \breve{C}_1 \\ \breve{D}_1 \end{pmatrix} = Ce^{-\eta} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-\eta - i\frac{\pi}{4}} & e^{\eta + i\frac{\pi}{4}} \\ \frac{1}{2} e^{-\eta + i\frac{\pi}{4}} & e^{\eta + i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 1-i \end{pmatrix}$.

Принимая $j = 1$ в формулах (14), (15), убеждаемся в их достоверности. Перепишем (10) в виде

$$\hat{C}_j = \frac{C\sin\varphi\sin(ju)}{\sin u}, \ \hat{D}_j = \frac{Ce^{-\eta}}{\sin u}\left(\sin\left((j+1)u\right) - \frac{e^{-\eta}}{2}\cos\varphi\sin(ju)\right). \quad (16)$$

В выражениях (14)–(16) константа C определяется из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(x)\right|^2 = \sum_{j=0}^{N_W}\int_{b_j}^{a_{j+1}}\left|\hat{\psi}_j(x)\right|^2 dx + \sum_{j=1}^{N_W}\int_{a_j}^{b_j}\left|\breve{\psi}_j(x)\right|^2 dx = 1. \quad (17)$$

В (17) N_W – полное количество потенциальных ям в системе. Соответствующее количество потенциальных барьеров $N_W + 1$. Координаты точек поворота a_j, b_j вычисляются из равенства $U_C(x) = E$. При этом для 0-го барьера $b_0 = -\infty$ и N_W-го барьера $a_{N_W+1} = +\infty$ [2].

Принимая в области N_W-го барьера $\hat{D}_{N_W} = 0$, из (16), согласно равенству $\frac{1}{\sin u}\left(e^{-\eta}\sin\left((N_W+1)u\right) - \frac{e^{-2\eta}}{2}\cos\varphi\sin(N_W u)\right) = 0$, при условии $\eta >> 1$, пренебрегая слагаемым $\frac{e^{-2\eta}}{2}\cos\varphi\sin(N_W u) \to 0$, запишем спектральное уравнение для модели омических контактов $\frac{\sin\left((N_W+1)u\right)}{\sin u} = 0$. Его решение $u_s = \pm\frac{\pi s}{N_W+1}$ выполняется при условии $s \neq 0$, $s \neq N_W + 1$.

Из (8), полагая $e^{-\eta} \to 0$, имеем $\cos\varphi = e^{-\eta}\cos u$, откуда, в силу $\kappa = e^{-\eta}\cos u << 1$, когда $\varphi = \arccos\kappa \approx \arccos 0 - \kappa$, запишем

$$\varphi_{n,s} \approx \mp\pi\left(n + \frac{1}{2}\right) \mp e^{-\eta_n}\cos\left(\frac{\pi s}{N_W+1}\right). \quad (18)$$

В (10) $\varphi_{n,s} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{a_j}^{b_j}\sqrt{E_{n,s}^{(0)} - \breve{U}_C(x)}dx$, $\eta_n = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{b_j}^{a_{j+1}}\sqrt{\hat{U}_C(x) - E_n^{(0)}}dx$; $\breve{U}_C(x)$, $\hat{U}_C(x)$ – соответственно потенциальная энергия протона, двигающегося в области потенциальной ямы, или барьера [2].

Для модели параболического потенциала принимаем функцию

$$\hat{U}_C(x) = \begin{cases} \dfrac{m\omega_0^2\left(x - \breve{x}_{0,j}\right)^2}{2}, \ a_j \le x \le b_j, \\ U_0\left(1 - \dfrac{4\left(x - \hat{x}_{0,j}\right)^2}{\delta_0^2}\right), \ b_j \le x \le a_{j+1}. \end{cases} \quad (19)$$

Здесь $\hat{U}_C(x) = U_{\max} > U_0$ при $x < 0$, $x > d$; $\breve{x}_{0,j} = ja$, $\widehat{x}_{0,j} = \breve{x}_{0,j} + \dfrac{a}{2} = \left(j + \dfrac{1}{2}\right)a$,

где $j = 1, 2, ..., N_W$.

Для j-й ямы $\varphi_{j,(n,s)} = \dfrac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{a_{j,(n,s)}}^{b_{j,(n,s)}}\sqrt{E_{n,s}^{(0)} - \breve{U}_{C,j}(x)}dx$, $\breve{U}_{C,j}(x) = \dfrac{m\omega_0^2\left(x - \breve{x}_{0,j}\right)^2}{2}$,

$a_{j,(n,s)} \le x \le b_{j,(n,s)}$, вычисляя из уравнения $E_{n,s}^{(0)} - \breve{U}_{C,j}(x) = 0$ точки поворота

$$a_{j,(n,s)} = \breve{x}_{0,j} - \sqrt{\frac{2E_{n,s}^{(0)}}{m\omega_0^2}} = ja - \sqrt{\frac{2E_{n,s}^{(0)}}{m\omega_0^2}},\ b_{j,(n,s)} = \breve{x}_{0,j} + \sqrt{\frac{2E_{n,s}^{(0)}}{m\omega_0^2}} = ja + \sqrt{\frac{2E_{n,s}^{(0)}}{m\omega_0^2}},$$

получим

$$\varphi_{j,(n,s)} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{a_{j,(n,s)}}^{b_{j,(n,s)}}\sqrt{E_{n,s}^{(0)} - \frac{m\omega_0^2\left(x - \breve{x}_{0,j}\right)^2}{2}}dx = \frac{4E_{n,s}^{(0)}}{\hbar\omega_0}\int\limits_0^1\sqrt{1 - y^2}\,dy = \frac{\pi E_{n,s}^{(0)}}{\hbar\omega_0},$$

т. е. приходим к инвариантной величине

$$\varphi_{n,s} = \frac{\pi E_{n,s}^{(0)}}{\hbar\omega_0}. \qquad (20)$$

В частности, $E_{n,s}^{(0)} = E_n^{(0)}$, пишем $\varphi_n = \dfrac{\pi E_n^{(0)}}{\hbar\omega_0}$.

Для j- го барьера

$$\eta_{j,(n,s)} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{b_{j,(n,s)}}^{a_{j+1,(n,s)}}\sqrt{\widehat{U}_{C,j}(x) - E_{n,s}^{(0)}}dx,\ \widehat{U}_{C,j}(x) = U_0\left(1 - \frac{4\left(x - \widehat{x}_{0,j}\right)^2}{\delta_0^2}\right),$$

$$b_{j,(n,s)} \le x \le a_{j+1,(n,s)},\ E_{n,s}^{(0)} - \widehat{U}_{C,j}(x) = 0,$$

$$b_{j,(n,s)} = \left(j + \frac{1}{2}\right)a - \frac{\delta_0}{2}\sqrt{1 - \frac{E_{n,s}^{(0)}}{U_0}},\ a_{j+1,(n,s)} = \left(j + \frac{1}{2}\right)a + \frac{\delta_0}{2}\sqrt{1 - \frac{E_{n,s}^{(0)}}{U_0}}$$

получим

$$\eta_{j,(n,s)} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{b_{j,(n,s)}}^{a_{j+1,(n,s)}}\sqrt{U_0\left(1 - \frac{4\left(x - \widehat{x}_{0,j}\right)^2}{\delta_0^2}\right) - E_{n,s}^{(0)}}\,dx = \frac{\pi\delta_0\sqrt{m}\left(U_0 - E_{n,s}^{(0)}\right)}{2\hbar\sqrt{2U_0}},$$

что указывает на вторую инвариантную величину

$$\eta_{n,s} = \frac{\pi\delta_0\sqrt{m}\left(U_0 - E_{n,s}^{(0)}\right)}{2\hbar\sqrt{2U_0}}. \qquad (21)$$

Отметим, что в случае $E_{n,s}^{(0)} = E_n^{(0)}$ из выражения для прозрачности параболического потенциального барьера $D\left(U_0, E_n^{(0)}\right) = \exp\left(-\dfrac{\pi\delta_0\sqrt{m}\left(U_0 - E_n^{(0)}\right)}{\hbar\sqrt{2U_0}}\right)$ [3], согласно известной формуле $D\left(E_n^{(0)}\right) = e^{-2\eta_n}$ [9], имеем

$$\eta_n = \frac{\pi\delta_0\sqrt{m}\left(U_0 - E_n^{(0)}\right)}{2\hbar\sqrt{2U_0}}. \tag{22}$$

Подстановка (20) в (18) дает спектр энергий

$$E_{n,s}^{(0)} = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\omega_0}{\pi}e^{-\eta_n}\cos\left(\frac{\pi s}{N_W + 1}\right). \tag{23}$$

Очевидно, что первое слагаемое в (23) есть энергетический спектр линейного гармонического осциллятора $E_n^{(0)} = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$, что отвечает модели изолированной потенциальной ямы: $\varphi_n = \dfrac{\pi E_n^{(0)}}{\hbar\omega_0} = \pi\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$. Второе слагаемое в (23) описывает эффект расщепления уровней энергии $E_n^{(0)}$ в энергетическую зону номера n, включающую N_W уровней. «Дну» n-й зоны соответствует уровень $s = N_W$ (минимальная энергия протона в n-й зоне)

$$E_{n,\min} = E_n^{(-)} = E_n^{(0)} - \frac{\hbar\omega_0}{\pi}\exp(-\eta_n)\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right). \tag{24}$$

«Потолку» n-й зоны соответствует уровень $s = 1$ (максимальная энергия протона в n-й зоне)

$$E_{n,\max} = E_n^{(+)} = E_n^{(0)} + \frac{\hbar\omega_0}{\pi}\exp(-\eta_n)\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right). \tag{25}$$

Ширина энергетической зоны номера n есть

$$\Delta E_n = E_{n,\max} - E_{n,\min} = \frac{2\hbar\omega_0}{\pi}\exp\left(-\eta_n\right)\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right). \tag{26}$$

Когда $N_W \to \infty$, в пределе имеем $\Delta E_n \to \dfrac{2\hbar\omega_0}{\pi}\exp(-\eta_n)$.

Максимальное и минимальное расстояния между уровнями энергии фиксированных m-й и n-й энергетических зон, когда $n > m$, равны:

$$\Delta E_{n,m}^{(\max)} = E_{n,\max} - E_{m,\min} =$$

$$= E_{n,m}^{(0)} + \frac{\hbar\omega_0}{\pi}\left(\exp(-\eta_n) + \exp(-\eta_m)\right)\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right), \tag{27}$$

$$\Delta E_{n,m}^{(\min)} = E_{n,\min} - E_{m,\max} =$$

$$= E_{n,m}^{(0)} - \frac{\hbar\omega_0}{\pi}\left(\exp(-\eta_n) + \exp(-\eta_m)\right)\cos\left(\frac{\pi}{N_W + 1}\right). \quad (28)$$

В пределе $N_W \to \infty$ имеем

$$\Delta E_{n,m}^{(\max)} \to E_{n,m}^{(0)} + \frac{2\hbar\omega_0}{\pi}\left(e^{-\eta_n} + e^{-\eta_m}\right),$$
$$\Delta E_{n,m}^{(\min)} \to E_{n,m}^{(0)} - \frac{2\hbar\omega_0}{\pi}\left(e^{-\eta_n} + e^{-\eta_m}\right). \quad (29)$$

На основании (27), (28) имеем

$$\Delta E_{n,m}^{(\max)} = \Delta E_{n,m}^{(\min)} + \Delta E_n + \Delta E_m . \quad (30)$$

Равновесная матрица плотности для протонов $\rho_{pr,n}^{(0)}$ [5] позволяет рассчитать заселенности уровней энергии невозмущенного спектра $E_{n,s}^{(0)}$ в области n-й энергетической зоны, в числах заполнения [5]

$$a_{n,s}^{(0)+} a_{n,s}^{(0)} = \rho_{pr,(n,s)}^{(0)} = N_{pr,F}\left[Z_{pr}^{(0)}\right]^{-1} \exp\left(-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{k_B T}\right). \quad (31)$$

Статистическая сумма в (31) равна $Z_{pr}^{(0)} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{s=1}^{N_W} \exp\left(-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{k_B T}\right)$ [5].

2. Волновые функции стационарных состояний протона

Подстановка рекуррентных формул (14), (15) в (3) дает

$$\breve{\psi}_{j,(n,s)}(x) = \frac{2C_{n,s}\cdot\breve{\Phi}_{j,(n,s)}}{\sqrt{p_{j,(n,s)}(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_{j,(n,s)}}^{x} p_{j,(n,s)}(x)dx - \breve{\delta}_{j,(n,s)}\right). \quad (32)$$

В (32) приняты сокращенные обозначения:

$$\breve{\Phi}_{j,(n,s)} = \sqrt{\left(\breve{\Gamma}_{1,j,(n,s)}\right)^2 + \left(\breve{\Gamma}_{2,j,(n,s)}\right)^2}\ ,\ \operatorname{tg}\left(\breve{\delta}_{j,(n,s)}\right) = \frac{\breve{\Gamma}_{2,j,(n,s)}}{\breve{\Gamma}_{1,j,(n,s)}},$$

$$\breve{\Gamma}_{1,j,(n,s)} = \frac{1}{\sqrt{2}\sin(u_s)}\left(\frac{e^{-\eta_{n,s}}}{2}\sin\left((j-1)u_s\right)\left(\sin(\varphi_{n,s}) - \cos(\varphi_{n,s})\right) + \sin(ju_s)\right),$$

$$\breve{\Gamma}_{2,j,(n,s)} = \frac{1}{\sqrt{2}\sin(u_s)}\left(\sin(ju_s) - \frac{e^{-\eta_{n,s}}}{2}\left(\cos(\varphi_{n,s}) + \sin(\varphi_{n,s})\right)\sin\left((j-1)u_s\right)\right).$$

Подстановка рекуррентных формул (16) в (4) дает

$$\hat{\psi}_{j,(n,s)}(x) = \frac{2C_{n,s}\left(\Lambda_{1,j,(n,s)}\cdot\Lambda_{2,j,(n,s)}\right)}{\sqrt{\left|p_{j,(n,s)}(x)\right|}}\times$$
$$\times\operatorname{ch}\left(\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{b_{j,(n,s)}}^{x}\left|p_{j,(n,s)}(x)\right|dx\right)+\hat{\delta}_{j,(n,s)}\right). \tag{33}$$

В (33) приняты сокращенные обозначения:

$$\Lambda_{1,j,(n,s)} = \frac{e^{-\eta_{n,s}}}{\sin(u_s)}\left(\sin\left((j+1)u_s\right)-\frac{e^{-\eta_{n,s}}}{2}\cos(\varphi_{n,s})\sin(ju_s)\right),$$

$$\Lambda_{2,j,(n,s)} = \frac{\sin(\varphi_{n,s})\sin(ju_s)}{\sin(u_s)},$$

$$\operatorname{th}\left(\hat{\delta}_{j,(n,s)}\right) = \frac{\Lambda_{1,j,(n,s)}-\Lambda_{2,j,(n,s)}}{\Lambda_{1,j,(n,s)}+\Lambda_{2,j,(n,s)}}.$$

Расчет фаз волновых функций строим из выражений

$$\varphi_{j,(n,s)}(x) = \frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_{j,(n,s)}}^{x} p_{j,(n,s)}(x)dx =$$
$$= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{a_{j,(n,s)}}^{x}\sqrt{E_{n,s}^{(0)}-\frac{m\omega_0^2\left(x-\breve{x}_{0,j}\right)^2}{2}}dx, \tag{34}$$

$$\eta_{j,(n,s)}(x) = \frac{1}{\hbar}\int\limits_{b_{j,(n,s)}}^{x}\left|p_{j,(n,s)}(x)\right|dx =$$
$$= \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int\limits_{b_{j,(n,s)}}^{x}\sqrt{U_0\left(1-\frac{4\left(x-\hat{x}_{0,j}\right)^2}{\delta_0^2}\right)-E_{n,s}^{(0)}}dx. \tag{35}$$

На основании (34), (35) имеем

$$\varphi_{j,(n,s)}(x) = \frac{E_{n,s}^{(0)}}{\hbar\omega_0}\left\{\arcsin\left(\left(x-\breve{x}_{0,j}\right)\sqrt{\frac{m\omega_0^2}{2E_{n,s}^{(0)}}}\right)+\frac{\pi}{2}+\left(x-\breve{x}_{0,j}\right)\sqrt{\frac{m\omega_0^2}{2E_{n,s}^{(0)}}}\times\right.$$
$$\left.\times\sqrt{1-\left(\frac{m\omega_0^2}{2E_{n,s}^{(0)}}\left(x-\breve{x}_{0,j}\right)^2\right)}\right\}, \tag{36}$$

$$\eta_{j,(n,s)}(x)=\frac{\delta_0\sqrt{m}\left(U_0-E_{n,s}^{(0)}\right)}{2\hbar\sqrt{2U_0}}\left\{\arcsin\left(\left(x-\hat{x}_{0,j}\right)\left(\frac{2}{\delta_0}\sqrt{\frac{1}{1-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{U_0}}}\right)\right)+\frac{\pi}{2}+\right.$$

$$\left.+\left(x-\hat{x}_{0,j}\right)\left(\frac{2}{\delta_0}\sqrt{\frac{1}{1-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{U_0}}}\right)\times\sqrt{1-\left(\frac{2}{\delta_0}\sqrt{\frac{1}{1-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{U_0}}}\right)^2\left(x-\hat{x}_{0,j}\right)^2}\right\}. \quad (37)$$

Поскольку волновые функции (32), (33) работают в областях изменения переменной x, удаленных от точек поворота $a_{j,(n,s)}$, $b_{j,(n,s)}$, прямой расчет матричных элементов физической величины (например, дипольного момента протона) требует предварительного исследования свойств подынтегральных функций в выражениях $(p_x)_{(n,s);(m,l)}=q\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left[\psi_{(n,s)}\right]^*\hat{x}\psi_{(m,l)}dx$. Функции $\psi_{(n,s)}$, $\psi_{(m,l)}$ описывают волновые свойства протона в двух различных стационарных состояниях $E_{(n,s)}^{(0)}$, $E_{(m,l)}^{(0)}$, относящихся соответственно к зонам номера n, m. В случае быстро осциллирующих функций (32), (33) численный расчет матричных элементов $(p_x)_{(n,s);(m,l)}$ сводится к предварительной оценке поведения функций $\psi_{\mathrm{j,(n,s)}}$, $\psi_{j,(m,l)}$ в особых точках комплексного потенциала $\hat{U}_C(z)$ [9]. Решение этого вопроса будет выполнено в дальнейшем.

Выводы

1. В квазиклассическом приближении методом Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ-методом) строится решение стационарного уравнения Шрёдингера для протона, двигающегося в невозмущенном одномерном периодическом потенциальном поле параболической формы. Контакты на границах кристалла приняты омическими (вероятность просачивания носителей заряда (протонов) через границы диэлектрика есть конечная величина). Построены рекуррентные формулы для расчета волновых функций протона в области произвольной потенциальной ямы, или барьера.

2. Обнаружена зонная структура невозмущенного энергетического спектра протона в КВС. Получены выражения для расчета параметров энергетической зоны, соответствующей заданному уровню энергии стационарного спектра протона в изолированной потенциальной яме (в области локализации протона на водородной связи с заданной энергией активации). Аналитически установлено прямое влияние прозрачности потенциального барьера на ширины зон разрешенных и запрещенных энергий протона.

3. Числа заполнения уровней энергии в пределах отдельных энергетических зон рассчитываются с помощью равновесной матрицы плотности для протонов.

4. Результаты исследований в перспективе найдут практическое применение при разработке технологий компьютерного прогнозирования электрофизических

свойств и при расчете параметров элементов микроэлектроники, оптоэлектроники, топливных элементов водородной энергетики и других элементов установок и систем, работающих в условиях низких и сверхнизких температур.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Тонконогов М.П.** Диэлектрическая спектроскопия кристаллов с водородными связями. Протонная релаксация // УФН. – 1998. – Т. 168, № 1. – С. 29–54.
2. **Калытка В.А., Коровкин М.В.** Протонная проводимость: монография. – Saarbrucken: LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 180 с. – ISBN-13: 978-3-659-68923-9. – ISBN-10: 3659689238. – EBAN: 9783659689239.
3. **Калытка В.А., Коровкин М.В.** Дисперсионные соотношения для протонной релаксации в твердых диэлектриках // Известия вузов. Физика. – 2016. – Т. 59, № 12. – С. 150–159.
4. **Калытка В.А., Коровкин М.В.** Квантовые эффекты при протонной релаксации в области низких температур // Известия вузов. Физика. – 2016. – Т. 59, № 7.– С. 74–79.
5. Quantum electrical phenomena at low temperatures / V.A. Kalytka, B.S. Ospanov, Zh.B. Baidildina, Y.S. Rymhanov // International Research Journal. – 2016. – N 11 (53), pt. 4. – P. 57–60. – doi: 10.18454/IRJ.2016.53.081.
6. **Анненков Ю.М., Калытка В.А., Коровкин М.В.** Квантовые эффекты при миграционной поляризации в нанометровых слоях протонных полупроводников и диэлектриков при сверхнизких температурах // Известия вузов. Физика. – 2015. – Т. 58, № 1. – С. 31–37.
7. Размерные эффекты в слоях нанометровой крупности при установлении поляризации в кристаллах с водородными связями / М.П. Тонконогов, Т.А. Кукетаев, К.К. Фазылов, В.А. Калытка // Известия вузов. Физика. – 2005. – Т. 48, № 11. – С. 6–15.
8. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. – М.: Наука, 1976. – С. 27.
9. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. – М.: Наука, 1989. – С. 226.

ZONE STRUCTURE OF THE ENERGY SPECTRUM AND WAVE FUNCTIONS OF PROTON IN PROTON CONDUCTIVITY DIELECTRICS

Kalytka V.A.[1], Baimukhanov Z.K.[2], Aliferov A.I.[3], Mekhtiev A.D.[1]

[1] *Karaganda State Technical University, Karaganda, Kazakhstan*

[2] *Gumilyov L.N. National Research University, Astana, Kazakhstan*

[3] *Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

In quasi-classical approximation by the Wentzel – Kramers – Brillouin method (the WKB - method) quantum properties of the proton subsystem (interacting with the anion subsystem) in hydrogen bonded crystals (HBC) at low temperatures (70–100 K) are investigated. A mathematical model is constructed based on solving stationary the Schrödinger equation for the particle (proton), moving in the one-dimensional periodic potential field (image) unperturbed by an external (polarizing) field, for the case of ohmic contacts at the boundaries of the crystal (the work of the proton leaving the dielectric is a finite value). The recursion formulas for the proton wave function amplitudes in the area of an arbitrary potential well or a barrier are built. The zone structure of the proton energy spectrum in HBC is revealed, expressions for calculating the maximum energy (a 'ceiling' band), the minimum energy (a 'bottom' band) and an energy band width to the predetermined stationary state of the proton in an isolated potential well are found. Direct influence of a potential barrier transparency on the parameters of the energy bands and the width of the exclusion zone is determined. Expressions for populations of unperturbed energy levels within the area of the fixed proton energy band are recorded with the help of a statistical matrix recorder. The phases of quasi-classical wave function for the proton are calculated. These results will be used in the investigation of quantum (tunneling) proton conductivity in the development of electrochemical device elements (solid electrolytes), the fuel cell hydrogen energy elements, chip elements for measuring, control and analysis of devices operation at low and extra – low temperatures.

Keywords: hydrogen bonded crystals (HBC); zone structure of the energy spectrum of the proton in HBC; quasi – classical approximation in quantum mechanics; proton balanced density matrix; the wave functions at stationary states of proton in HBC.

DOI: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31

REFERENCES

1. Tonkonogov M.P. Dielektricheskaya spektroskopiya kristallov s vodorodnymi svyazyami. Protonnaya relaksatsiya [Dielectric spectroscopy of crystals with hydrogen bonds. Proton relaxation]. *Uspekhi fizicheskikh nauk – Physics-Uspekhi*, 1998, vol. 168, no. 1, pp. 29–54. (In Russian).
2. Kalytka V.A., Korovkin M.V. *Protonnaya provodimost'* [Proton conductivity]. Saarbrucken, LAP Lambert Academic Publishing, 2015. 180 p. ISBN-13: 978-3-659-68923-9. ISBN-10: 3659689238. EBAN: 9783659689239.
3. Kalytka V.A., Korovkin M.V. Dispersion relations for proton relaxation in solid dielectrics. *Russian Physics Journal*, 2017, vol. 59, no. 12, pp. 2151–2161. doi: 10.1007/s11182-017-1027-5. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Fizika*, 2016, vol. 59, no. 12, pp. 150–159.
4. Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects at a proton relaxation at low temperatures. *Russian Physics Journal*, 2016, vol. 59, no. 7, pp. 994–1001. doi: 10.1007/s11182-016-0865-x. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Fizika*, 2016, vol. 59, no. 7, pp. 74–79.
5. Kalytka V.A., Ospanov B.S., Baidildina Zh.B., Rymhanov Y.S. Quantum electrical phenomena at low temperatures. *International Research Journal*, 2016, no. 11 (53), pt. 4, pp. 57–60. doi: 10.18454/IRJ.2016.53.081.
6. Annenkov Yu.M., Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects under migratory polarization in nanometer layers of proton semiconductors and dielectrics at ultralow temperatures. *Russian Physics Journal*, 2015, vol. 58, no. 1, pp. 35–41. doi: 10.1007/s11182-015-0459-z. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Fizika*, 2015, vol. 58, no. 1, pp. 31–37.
7. Tonkonogov M.P., Kuketayev T.A., Fazylov K.K., Kalytka V.A. Dimensional effects in nanosized layers under establishing polarization in hydrogen-bonded crystals. *Russian Physics Journal*, 2005, vol. 48, no. 11, pp. 1110–1119. Translated from *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Fizika*, 2005, vol. 48, no. 11, pp. 6–15.
8. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika*. T. 5. *Statisticheskaya fizika* [Theoretical physics. Vol. 5. Statistical physics]. Moscow, Nauka Publ., 1976, p. 27.
9. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoreticheskaya fizika*. T. 3. *Kvantovaya mekhanika* [Theoretical physics. Vol. 3. Quantum mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1989, p. 226.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Калытка Валерий Александрович – родился в 1976 году, канд. физ.-мат. наук, доктор PhD (по направлению «Физика»), доцент кафедры «Энергетические системы» Карагандинского государственного технического университета (КарГТУ). Область научных интересов: теоретическая и математическая физика; физика твердого тела; диэлектрическая спектроскопия; физика конденсированного состояния. Опубликовано более 115 научных трудов. (Адрес: 100000, Казахстан, г. Караганда, пр. Бульвар Мира, 56. E-mail: kalytka@mail.ru).

Kalytka Valeriy Alexandrovich (was born in 1976 year) – Candidate of Sciences (Phys.&Math.), Doctor of Philosophy (in Physics), associate professor at «Power engineering systems» department in Karaganda state technical university (KSTU). His scientific investigate (research) interests are currently focused on theoretical and mathematical physics, Solid state physics, dielectric spectroscopy and Physics of condensed media. He is the author (and coauthor) of more than 115 scientific proceedings. (Address: 56, Bulvar Mira Av., Karaganda, 100000, Kazakhstan. E-mail: kalytka@mail.ru).

Баймуханов Зейн Кайрбекович – родился в 1974 году, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Техническая физика» Евразийского национального университета (ЕНУ) им. Л.Н. Гумилева. Область научных интересов: экспериментальная физика; математическое моделирование физического эксперимента; физика конденсированного состояния. Опубликовано более 50 научных трудов. (Адрес: 010002, Казахстан, г. Астана, ул. Победы, 62. E-mail: zein.77@mail.ru).

Baimukhanov Zein Kairbekovich (was born in 1974 year) – Candidate of Sciences (Phys.&Math.), associate professor at «Technical Physics» department in Gumilyov L.N. National Research University (Eurasian National University (ENU)). His scientific investigate (research) interests are currently focused on experimental physics, mathematical modeling of physical experiment and Physics of condensed media. He is the author (and coauthor) of more than 50 scientific proceedings. (Address: 62, Pobeda st., Astana, 010002, Kazakhstan. E-mail: zein.77@mail.ru).

Алиферов Александр Иванович – родился в 1956 г., д-р техн. наук, зав. кафедрой «Автоматизированные электротехнологические установки» Новосибирского государственного технического университета (НГТУ). Область научных интересов: ресурсосберегающие электротехнологии. Опубликовано более 170 научных трудов, в том числе 6 монографий. (Адрес: Россия, 630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20. E-mail: aliferov@corp.nstu.ru).

Aliferov Aleksandr Ivanovich – (was born in 1956 year) – D. Sc. (Eng.), chief at «Automation of Electric Technological Installations» department in Novosibirsk state technical university (NSTU). His scientific investigate (research) interests are resource-saving electrotechnologies. He is the author (and coauthor) more than 170 scientific proceedings, including 6 monographs. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: aliferov@corp.nstu.ru).

Мехтиев Али Джаваншировиич – родился в 1972 г., канд. техн. наук, зав. кафедрой «Энергетические системы» Карагандинского государственного технического университета (КарГТУ). Область научных интересов: радиотехника и приборостроение, технологии и системы связи, теплоэнергетика и электроэнергетика. Опубликовано более 200 научных трудов. (Адрес: 100000, Казахстан, г. Караганда, пр. Бульвар Мира, 56. E-mail: barton.kz@mail.ru).

Mekhtiev Ali Dzhavanshirovich – (was born in 1972 year) – D. Sc. (Eng.), chief at «Power engineering systems» department in Karaganda state technical university (KSTU). His scientific investigate (research) interests are currently focused on radio electronics engineering and device construction, technologies and communication system chair, heart and power engineering. He is the author (and coauthor) more than 200 scientific proceedings. (Address: 56, Bulvar Mira Av., Karaganda, 100000, Kazakhstan. E-mail: barton.kz@mail.ru).

Статья поступила 08 июня 2017 г.
Received June 08, 2017

To Reference:

Kalytka V.A., Baimukhanov Z.K., Aliferov A.I., Mekhtiev A.D. Zonnaya struktura energeticheskogo spektra i volnovye funktsii protona v dielektrikakh s protonnoi provodimost'yu [Zone structure of energy spectrum and wave functions of proton in proton conductivity dielectrics]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii – Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2017, no. 2 (35), pp. 18–31. doi: 10.17212/1727-2769-2017-2-18-31